

Wissenschaftliche Berichte  
des  
Instituts für Meteorologie und Klimaforschung  
der Universität Karlsruhe

Nr. 32

**TRANSPORT UND CHEMISCHE UMWANDLUNG VON  
LUFTSCHADSTOFFEN IM NAHBEREICH VON AUTOBAHNEN -  
NUMERISCHE SIMULATIONEN**

von

Dominique Bäumer

Kaiserstr. 12, 76128 Karlsruhe

Juni 2003

ISSN 0179 – 5619

Dissertation genehmigt von der  
Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe

Herausgegeben im Selbstverlag  
des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung  
der Universität Karlsruhe (gemeinsam betrieben mit dem  
Forschungszentrum Karlsruhe)  
Kaiserstr. 12, 76128 Karlsruhe  
Herausgeber: Prof. Dr. Ch. Kottmeier

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird auf der Basis von Turbulenzmessungen an einer Autobahn eine Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz entwickelt und in das Modellsystem KAMM/DRAIS integriert, um die Ausbreitung und die chemische Umwandlung von Luftschadstoffen im Nahbereich einer Autobahn zu simulieren. Die Autobahn beeinflusst das Turbulenzfeld durch zwei unterschiedliche Mechanismen, die fahrzeuginduzierte Turbulenz und die Turbulenzproduktion infolge der Überströmung des Autobahndammes, da dieser als Strömungshindernis wirkt. Beide Effekte werden im gemessenen Turbulenzfeld nachgewiesen und parametrisiert. Anhand eines Vergleichs von gemessenen vertikalen Profilen der Differenz der CO-Konzentration zwischen Lee und Luv einer Autobahn und gemessenen vertikalen Konzentrationsprofilen eines Tracers bei einem aus der Literatur bekannten Ausbreitungsexperiment mit Modellergebnissen kann die neue Parametrisierung verifiziert werden. Nur bei Verwendung der vollständigen Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz wird die Abgasfahnenhöhe und die bodennahe Maximalkonzentration richtig beschrieben.

Mit dem so erweiterten Modellsystem werden im folgenden zeitliche und räumliche Konzentrationsverteilungen reaktiver Substanzen im Nahbereich der Autobahn simuliert. Am Beispiel der chemischen Wechselwirkung von Stickoxiden und Ozon kann der große Einfluss der Chemie aufgezeigt werden. So zeigt NO ein sehr viel schnelleres Abklingen im Lee der Autobahn im Vergleich zum nur vom Transport beeinflussten CO, während NO<sub>2</sub> ein viel langsames Abklingen erkennen lässt, da es chemisch produziert wird. Einige weitere nicht emittierte Substanzen weisen bodennah einen signifikanten Konzentrationsrückgang beim Überströmen der Autobahn auf. Das OH-Radikal zeigt zusätzlich einen deutlichen Anstieg im oberen Bereich der Abgasfahne.

In einem weiteren Abschnitt wird die Ausbreitung von auf der Autobahn emittiertem Grobstaub simuliert. Dieser Grobstaub entsteht vor allem durch Abrieb von Reifen, Bremsbelägen und Fahrbahnoberfläche sowie durch Resuspension. Die simulierten Konzentrationsverteilungen im Lee der Autobahn lassen einen großen Einfluss der autobahninduzierten Turbulenz erkennen. Die Reichweite der Partikel hängt stark von ihrem Durchmesser ab und nimmt für sehr große Partikel mit einem Durchmesser von 100 µm geringe Werte von einigen Metern an. Kleine Partikel mit einem Durchmesser von 1 µm verhalten sich im Nahbereich der Autobahn sehr ähnlich wie ein inertes Gas. Das charakteristische Aussehen gemessener Größenverteilungen des Grobstaubs kann mit den Modellrechnungen erklärt werden.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Allgemeines . . . . .	1
1.2	Zielsetzung . . . . .	3
1.3	Kenntnisstand . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Das Modellsystem</b>	<b>13</b>
2.1	Das Strömungsmodell . . . . .	13
2.2	Das Ausbreitungsmodell . . . . .	20
2.2.1	Die Diffusionsgleichung . . . . .	20
2.2.2	Die quellentfernungsabhängige Schließung . . . . .	21
2.2.3	Die Randbehandlung . . . . .	26
2.2.4	Die Gitterstruktur . . . . .	27
2.3	Das Chemiemodell . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Die Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz</b>	<b>33</b>
3.1	Die Messkampagne BABII . . . . .	33
3.2	Messergebnisse . . . . .	37
3.2.1	Turbulente kinetische Energie . . . . .	37
3.2.2	Verkehr und Turbulenz . . . . .	42
3.3	Die Parametrisierung der fahrzeuginduzierten Turbulenz und der Überströmung . . . . .	47
3.4	Vertikale und horizontale Diffusionskoeffizienten . . . . .	53

<b>4</b>	<b>Berechnete Konzentrationsverteilungen gasförmiger Substanzen</b>	<b>63</b>
4.1	Gemessene und simulierte CO-Vertikalprofile . . . . .	63
4.2	Konzentrationsverteilungen ausgewählter Substanzen . . . . .	68
4.2.1	Die Auswahl der Substanzen . . . . .	68
4.2.2	Tagesgänge . . . . .	69
4.2.3	Vertikalprofile und Fahnenhöhen . . . . .	73
4.2.4	Horizontalprofile und Abklingraten . . . . .	82
<b>5</b>	<b>Berechnete Konzentrationsverteilungen des verkehrsbedingten Grobstaubs</b>	<b>91</b>
5.1	Die Bedeutung des verkehrsbedingten Grobstaubs . . . . .	91
5.2	Der Straßenverkehr als Quelle für Grobstaub . . . . .	93
5.2.1	Reifenabrieb . . . . .	93
5.2.2	Bremsenabrieb . . . . .	94
5.2.3	Fahrbahnabrieb . . . . .	94
5.2.4	Verkehrsbedingte Resuspension und gesamte Grobstaubemission	95
5.3	Die Diffusionsgleichung für Grobstaub . . . . .	95
5.4	Konzentrationsverteilungen . . . . .	96
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>109</b>
<b>7</b>	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>113</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>125</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>139</b>
A.1	Liste der Substanzen in RADM2 . . . . .	139
A.2	Liste der Reaktionen . . . . .	141
A.2.1	Photolysereaktionen . . . . .	141
A.2.2	Thermische Reaktionen . . . . .	142

# 1 Einleitung

## 1.1 Allgemeines

Kraftfahrzeugemissionen stellen neben den Emissionen durch Industrie, Hausbrand und Landwirtschaft eine sehr bedeutende Quelle von Luftverunreinigungen dar. Global geht ihre Zunahme nach wie vor ungebremsst vor sich, da die durch Abgasminderungstechniken erzielten Erfolge vielerorts durch stark steigende Fahrleistungen überkompensiert werden. Ihre chemische Zusammensetzung ist sehr vielfältig und laufenden Änderungen unterworfen, so dass sie viele luftchemische Reaktionen in Gang setzen oder modifizieren können. Neben den gasförmigen Substanzen werden zudem Aerosolpartikel freigesetzt, die ebenfalls die Luftqualität beeinträchtigen. Ein Teil der Aerosolpartikel rührt unmittelbar vom Verbrennungsprozess insbesondere in Dieselmotoren her. Ein anderer Teil entsteht durch vielfältige Abriebprozesse, wie z.B. Reifen-, Fahrbahn- oder Bremsenabrieb, oder durch Resuspension, d.h. Aufwirbelung von auf der Fahrbahn aufliegendem Staub. Auch die partikelförmigen Emissionen greifen in luftchemische Vorgänge ein. Emissionen des Verkehrs führen somit zu weitreichenden Beeinträchtigungen der natürlichen Stoffkreisläufe, wodurch die Lebensbedingungen von Pflanzen, Tieren und Menschen verändert werden (Hamilton und Harrison 1991).

Aktuelle Umweltprobleme als Folge der Emissionen des Straßenverkehrs sind einerseits die hohen Konzentrationen direkt emittierter Substanzen insbesondere in der Nähe stark befahrener Straßen wie z.B. Autobahnen, Bundesstraßen oder städtischer Hauptverkehrsachsen. Andererseits greifen die Emissionen des Kraftfahrzeugverkehrs in die vielfältigen chemischen Prozesse ein, die zur Bildung des Photosmogs bei sommerlichen Hochdruckwetterlagen führen. Dabei treten verbreitet hohe Ozonkonzentrationen auf, die als gesundheitsschädlich angesehen werden. In den letzten Jahren wurde darüber hinaus die Bedeutung gasförmiger Emissionen bei der Partikelneubildung erkannt. Partikelförmige Luftverunreinigungen stellen in hohen Konzentrationen eine ernst zu nehmende Gesundheitsgefährdung dar.

Die Ausbreitung von Luftverunreinigungen in der bodennahen Atmosphäre wird in entscheidendem Maße von ihrem Strömungs- und Turbulenzzustand bestimmt. Au-

ßerdem treten viele atmosphärische Prozesse auf, die die Konzentrationsverteilungen in Abhängigkeit von Raum und Zeit beeinflussen. Zusätzlich zu den chemischen Reaktionen modifiziert beispielsweise die Deposition den Gehalt an Luftbeimengungen. Mit Hilfe komplexer Ausbreitungsmodelle lässt sich die Transportgleichung numerisch lösen, so dass die Felder der Immissionskonzentrationen prognostizierbar werden.

Neben den gasförmigen Luftverunreinigungen sind in jüngster Zeit die partikelförmigen, die Aerosolpartikel, zunehmend zum Gegenstand der Ausbreitungsrechnung geworden. Das troposphärische Aerosol greift in eine Vielzahl von atmosphärischen Prozessen ein. Eine Übersicht über diese Prozesse und die Wirkungen des Aerosols findet man bei Riemer (2002). Partikel wirken als Kondensationskeime, greifen in die heterogene Chemie ein, beeinflussen Strahlungshaushalt und damit auch Sichtweite und Klima, modifizieren das luftelektrische Feld und können auf vielfältige Weise mit der Biosphäre wechselwirken. Aus epidemiologischen Studien der jüngsten Vergangenheit weiß man, dass Aerosolpartikel sowohl für akute als auch für langfristige negative Effekte auf die Gesundheit des Menschen verantwortlich sind. Eine ausführliche Zusammenstellung dieser Studien findet man bei BUWAL (2001). Dabei sind Verkehrsteilnehmer einer noch deutlich höheren persönlichen Exposition ausgesetzt, als von Messungen an straßennahen Stationen zu erwarten wäre (Adams et al. 2002; Chan et al. 2002). Insbesondere der feine Partikelanteil mit Durchmessern kleiner als 2,5 Mikrometer ist nach neuesten Ergebnissen von Pope et al. (2002) und Maynard und Maynard (2002) mit in belasteten Gebieten langfristig erhöhten Mortalitätsraten korreliert. Dies wird auf das unterschiedliche Depositionsverhalten von Partikeln verschiedener Größe zurückgeführt, da nur die kleineren bis in die Lunge vordringen können, wohingegen die größeren bereits im oberen Atemtrakt deponiert werden. Martonen et al. (2002) simulierte die Deposition von Partikeln im menschlichen Atemtrakt und konnte neben der bereits bekannten Abhängigkeit von der Partikelgröße auch eine signifikante Abhängigkeit von der Durchflussrate und damit der momentanen Atemaktivität aufzeigen. Die genaue Wirkungsweise der Aerosolpartikel auf den menschlichen Organismus bleibt ein aktueller Forschungsgegenstand benachbarter Disziplinen. Die Europäische Kommission hat bereits reagiert und die Richtlinie (1999/30 EG) verabschiedet. Die dort genannten Grenzwerte für die Partikelkonzentrationen werden derzeit in den meisten Ländern der EU überschritten. Auch in Deutschland wird es schwierig sein, die dort genannten Grenzwerte dauerhaft einzuhalten.

Aus dem Straßenverkehr stammen einerseits feine Partikel als Produkt der Verbrennungsprozesse insbesondere in Dieselmotoren. Andererseits stellen die zahlreichen Ab-



riebprozesse wie z.B. an Reifen, Bremsen und Straßenbelägen sowie die Aufwirbelung von auf der Straße aufliegendem Staub eine weitere Quelle von zumeist etwas gröberen Partikeln dar. Während die Partikel aus dem Verbrennungsprozess auf Prüfständen quantifiziert und durch Abgasnachbehandlungsverfahren wie Katalysatoren oder Rußfilter zurückgehalten werden können, gestaltet sich die Quantifizierung der Abrieb- und Aufwirbelungspartikel ungleich schwerer. Ebenso sind emissionsmindernde Maßnahmen weitaus schwieriger oder nahezu unmöglich. Da die Fahrleistungen sowohl global als auch lokal weiter steigen werden (UMEG 2001), ist mit einer deutlichen Zunahme der Emission von Abrieb- und Aufwirbelungspartikeln zu rechnen, während bei den Partikeln aus der Verbrennung durch den technischen Fortschritt bei den Partikelfiltern und Motoren mit einem deutlichen Rückgang gerechnet werden kann (Ntziachristos und Samaras 2001; Pregger und Friedrich 2002). In den kommenden Jahren ist daher mit einer deutlichen Zunahme der Bedeutung der Abrieb- und Aufwirbelungspartikel zu rechnen.

## 1.2 Zielsetzung

Das vorrangige Ziel der vorliegenden Untersuchungen ist die Berechnung der zweidimensionalen Konzentrationsverteilung der wichtigsten Substanzen im Lee einer Autobahn bei senkrechter Anströmung mittels eines Gitterpunktmodells. Besonderes Interesse liegt hierbei auf dem Abklingverhalten der emittierten oder chemisch produzierten Substanzen mit zunehmender Entfernung von der Quelle.

Da auf der Autobahn durch die Fahrzeuge Turbulenz produziert wird, ist mit einer stark erhöhten turbulenten Diffusion im Nahbereich der Fahrbahnen zu rechnen. Durch ihre exponierte Lage auf einem Damm aus Gründen des Hochwasserschutzes kann die Autobahn ebenfalls als Strömungshindernis wirken. Folgende Fragen sollen daher auf der Basis von Messungen beantwortet werden:

- Kann die fahrzeuginduzierte Turbulenz nachgewiesen werden?
- Führt bereits die Überströmung des Autobahndammes zu einer Turbulenzproduktion?

Um die Auswirkungen der autobahninduzierten Turbulenz auf die Konzentrationsverteilungen im Lee der Autobahn zu untersuchen, muss sie in den numerischen Simulationen der Ausbreitung berücksichtigt werden. In diesem Zusammenhang ergeben sich die folgenden Aufgaben:

- Wie kann die autobahninduzierte Turbulenz im Ausbreitungsmodell parametrisiert werden?
- Führt die Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz zu einer besseren Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Vertikalprofilen einer auf der Autobahn emittierten chemisch inerten Substanz?

Neben den direkt emittierten Substanzen können ebenfalls Substanzen aus der Umgebungsluft signifikante Konzentrationsänderungen aufgrund chemischer Umwandlungen beim Überströmen der Autobahn aufweisen. Für einen Teil der Substanzen existieren bisher nur wenige Messungen und Modellrechnungen haben daher einen großen Stellenwert bei der Verbesserung des Verständnisses der Transport- und Umwandlungsvorgänge. Folgende Aspekte sind von besonderem Interesse:

- Welche Substanzen zeigen eine durch chemische Umwandlungen bewirkte Konzentrationsänderung im Lee der Autobahn?
- Wie unterscheiden sich die Abklingraten von inerten Substanzen und schnell reagierenden Substanzen und wie weit reicht der Einfluss der Autobahnabgase?

Da die Autobahn darüber hinaus infolge verschiedener Abriebprozesse (Reifen, Bremsbeläge, Fahrbahn) und Resuspension, d. h. Aufwirbelung von auf den Fahrbahnen aufliegenden Partikeln, eine bedeutende Quelle für Grobstaub darstellt, besteht ebenfalls Interesse an den Konzentrationsverteilungen grober Partikel:

- Wie wirkt sich die autobahninduzierte Turbulenz auf die Konzentrationsverteilungen des Grobstaubs aus?
- Wie hängen Partikelgröße und maximale Reichweite zusammen?
- Kann die charakteristische vielfach gemessene Größenverteilung der groben Partikel auf Basis der Simulationsergebnisse erklärt werden?

Nach der Darstellung des Kenntnisstands und einer kurzen Beschreibung des Modellsystems werden Ergebnisse der Turbulenzmessungen vorgestellt. Im Folgenden wird eine Parametrisierung für die autobahninduzierte Turbulenz entwickelt und anhand der Messdaten verifiziert. Ihre Auswirkungen auf die Vertikalprofile einer inerten Substanz werden anhand eines Vergleichs von simulierten und gemessenen Profilen aufgezeigt. Konzentrationsverteilungen einiger schnell reagierender Substanzen werden simuliert

und ihr unterschiedliches Abklingverhalten analysiert. In einem weiteren Kapitel werden die verschiedenen Beiträge zur Grobstaubemission der Autobahn erläutert und Konzentrationsverteilungen des Grobstaubs im Lee der Autobahn simuliert und interpretiert.

## 1.3 Kenntnisstand

Die Ausbreitung von Automobilabgasen sowohl im Nachlauf einzelner Fahrzeuge als auch im Nahbereich der als Linienquelle zu behandelnden Straße wurde bereits von verschiedenen Autoren untersucht. Neben Feldexperimenten kamen auch Windkanalmessungen und Modellrechnungen zur Anwendung.

Danard (1972) verglich numerische Simulationen der Kohlenmonoxidkonzentration mit Messungen an einer Stadtautobahn in Toronto, Kanada. Die gemessene Abnahme der Konzentration mit zunehmender Entfernung von den Fahrbahnen konnte angenähert in den berechneten Konzentrationsfeldern wieder gefunden werden. Der Einfluss der fahrzeuginduzierten Turbulenz wurde in seinem Modell durch eine konstante Erhöhung des turbulenten Diffusionskoeffizienten auf  $20 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  unmittelbar über der Fahrbahn berücksichtigt. Von späteren Autoren (z.B. Eskridge et al. 1979) wird dieser Wert allgemein als zu hoch angesehen.

Ein aufwendiges Feldexperiment wurde nicht zuletzt wegen der Diskussion um die Einführung des Katalysators 1975 in den USA durchgeführt: Das General Motors Sulfate Experiment. Eine Beschreibung des Experiments findet man bei Cadle et al. (1977) und Wilson et al. (1977). Mit Hilfe von 350 Kraftfahrzeugen wurde auf einem Rundkurs eine Autobahn mit einer Verkehrsstärke von 5462 Fahrzeugen pro Stunde simuliert. In verschiedenen Abständen beiderseits der Straße wurden Profile von Temperatur, Wind mit Windfluktuationen und die Konzentrationen von Sulfaten sowie des eingesetzten Tracergases Schwefelhexafluorid gemessen. Chock (1980) konnte signifikante Unterschiede im Wind- und Turbulenzfeld zwischen Luv und Lee der Fahrbahn zeigen. Aufgrund spektraler Analysen der Fluktuationen bestimmte er die mittlere Größe der durch den Verkehr entstehenden Turbulenzelemente. Sie betrug wenige Meter. Erwartungsgemäß wurden im Lee durchweg höhere Konzentrationen der betrachteten Gase gemessen. Der Auftrieb der Abgase aufgrund ihrer Übertemperatur wirkte sich nach Chock (1977a) nur bei sehr geringen Windgeschwindigkeiten ( $< 1 \text{ m s}^{-1}$ ) aus.

Zimmermann und Thompson (1975) entwickelten ein Gauß-Modell mit dem Namen HIWAY speziell für die Ausbreitung von Verkehrsabgasen. Chock (1977b) verglich

Modellergebnisse von HIWAY mit Daten des General Motors Experiments. Nach seiner Analyse überschätzte das Modell die bodennahen Konzentrationen im Lee der Straße insbesondere bei stabilen Schichtungsverhältnissen, was er auf eine ungenügende Berücksichtigung der kraftfahrzeuginduzierten Turbulenz zurückführte. Rao et al. (1980) verglichen Ergebnisse von HIWAY sowohl mit General Motors Daten als auch mit anderen Modellergebnissen. Dabei kamen neben weiteren Gauß-Modellen auch numerische Modelle zur Anwendung. Wiederum lieferte HIWAY allgemein zu hohe Konzentrationen im Lee der Straße. Rao und Keenan (1980) stellten neue Ausbreitungsparameter für HIWAY vor, mit denen der Einfluss der vom Verkehr hervorgerufenen Turbulenz auf die straßennahe Vermischung der emittierten Gase besser berücksichtigt werden konnte. Chock (1978b) entwickelte ein weiteres Gauß-Modell, das keine systematischen Überschätzungen der Konzentration berechnete. Aufgrund der notwendigen Vereinfachungen wie z.B. der Höhenkonstanz des Windes und der Stationarität bei der Anwendung von Gauß-Modellen ist ihre Genauigkeit als eher gering anzusehen. Ein weiterer bedeutender Nachteil dieses Modelltyps ist die Nichtberücksichtigung chemischer Umwandlungen und topographischer Unebenheiten. Daher sind sie primär nur für eine grobe Abschätzung der mittleren Konzentrationen über längere Zeiträume geeignet. Chock (1978a) stellte ferner ein numerisches Ausbreitungsmodell mit einer Schließung zweiter Ordnung vor. Der fahrzeuginduzierten Turbulenz wurde über additive Zusatzterme bei den Diffusionskoeffizienten auf Basis der Daten des General Motors Sulfate Experiments Rechnung getragen.

In den Jahren 1976/77 wurde ein weiteres Feldexperiment am Long Island Expressway (New York) durchgeführt (Rao et al. 1979). Beidseitig der Fahrbahnen und auf dem Mittelstreifen wurden in verschiedenen Höhen hochfrequente Wind- und Temperaturmessungen sowie Messungen der Konzentrationen von Kohlenmonoxid und des Tracergases Schwefelhexafluorid realisiert. In Übereinstimmung mit den Daten des General Motors Experiments wurde auch hier durch den Vergleich der Windspektren im Luv und Lee der Straße ein Einfluss der fahrzeuginduzierten Turbulenz auf den Spektralbereich zwischen 0,1 Hz und 1,0 Hz detektiert, was Turbulenzelementen von der Größenordnung einiger weniger Meter entspricht. Es konnte keine geordnete Konvektion aufgrund der Übertemperatur der Abgase festgestellt werden, nicht einmal bei sehr stabiler Schichtung mit geringen Windgeschwindigkeiten. Die durch den Verkehr entstandenen zusätzlichen Diffusionskoeffizienten lagen bei sehr labiler Schichtung bei einigen Prozent der rein atmosphärischen Diffusionskoeffizienten, bei stabiler Schichtung waren sie von der gleichen Größenordnung und hatten daher einen sehr bedeutenden Anteil am Ausbreitungsvorgang.

Basierend auf einer störungstheoretischen Betrachtung der Bewegungsgleichungen gelangten Eskridge und Hunt (1979) zu einer expliziten Formulierung für die Windfluktuationen im Nachlauf von Kraftfahrzeugen. Diese lagen in der gleichen Größenordnung wie die gemessenen Varianzen der drei Windkomponenten beim General Motors Sulfate Experiment. Eskridge und Rao (1983) zeigten jedoch, dass die zeitliche Auflösung der General Motors Daten nicht ausreicht, um einen direkten Vergleich von simulierten und gemessenen Varianzen sinnvoll durchführen zu können, um so zu einer Validierung der Theorie zu gelangen. Sie machten daher Vorschläge zu Konzeptionierung und messtechnischer Ausrüstung zukünftiger Messkampagnen. Eskridge et al. (1979) integrierten die vom Verkehr hervorgerufenen Fluktuationen in ein numerisches Ausbreitungsmodell mit dem Namen ROADWAY. Dabei wurden aus den Varianzen als Folge der fahrzeuginduzierten Turbulenz mit Hilfe der Fahrzeuggeometrie zusätzliche Diffusionskoeffizienten bestimmt, die dann zu den atmosphärischen Diffusionskoeffizienten addiert wurden. Mit der Summe wurde im Folgenden die Massenerhaltungsgleichung für die betrachtete Substanz Schwefelhexafluorid numerisch approximiert. Die simulierten Konzentrationen lagen im Bereich der bei General Motors gemessenen. Die Abweichungen zwischen Messung und Simulation waren deutlich geringer als bei dem Gauß-Modell HIWAY. Nachteile dieser Parametrisierung für die fahrzeuginduzierte Turbulenz waren jedoch u.a. die Nichtberücksichtigung der atmosphärischen Schichtung und der Höhenabhängigkeit des Windes sowie die mangelnde Anwendbarkeit bei komplexeren Topographien aufgrund der fehlenden expliziten Berechnung von Advektion und Diffusion (Bäumer 1999).

Des Weiteren dienten Windkanalmessungen von Eskridge und Thompson (1982) einer Überprüfung der Formulierungen für die Varianzen im Lee von Fahrzeugen. Ein Ergebnis war eine zweidimensionale Interpolationsfunktion für die Verteilung der Varianzen im Querschnitt eines Nachlaufwirbels. Darüber hinaus wurden bestimmte Skalierungen zur Entdimensionierung der relevanten Gleichungen gegenüber der anfänglichen Theorie modifiziert. Eskridge und Rao (1986) berücksichtigten dies bei einer neuen Version ihres Modells ROADWAY und erweiterten es um einen Chemieteil, der die chemischen Wechselwirkungen von Stickoxiden und Ozon beinhaltete, so dass nun der straßennahe Ozonabbau simuliert werden konnte. Ein Vergleich der simulierten Konzentrationen des neuen ROADWAY-Modells mit anderen Modellergebnissen und General Motors Daten zeigte deutliche Fortschritte gegenüber älteren Modellen (Rao et al. 1986).

Den Einfluss der Geschwindigkeit von Fahrzeugen auf die turbulente Diffusion ihrer Abgase untersuchte Grønskei (1988) auf experimentellem Wege. Bei zumeist sehr stabiler Schichtung über schneebedecktem, ebenem Gelände wurden die Konzentrationsprofile

zweier Tracergase ( $\text{SF}_6$  und  $\text{CBrF}_3$ ) in mehreren Entfernungen zur Straße gemessen, wobei jedes Tracergas von Fahrzeugen mit einer bestimmten Geschwindigkeit emittiert wurde. Neben den atmosphärischen Parametern wie Schichtung und Windgeschwindigkeit konnte die Fahrzeuggeschwindigkeit als verantwortlich für die Höhe der Abgasfahne insbesondere im Nahbereich der Straße ausgemacht werden. Die Abhängigkeit von Konzentrationen im Lee einer Straße von der Fahrzeuggeschwindigkeit konnte ebenfalls auf Basis von Modellrechnungen gezeigt werden (Eskridge et al. 1991). Die ersten bekannten Messungen der turbulenten Strömung im Nachlaufbereich eines Fahrzeugs mit Anemometern auf einem mitgeführten Anhänger sind bei Rao et al. (2002) dokumentiert. Ein Vergleich der spektralen Dichte turbulenter kinetischer Energie im Nachlauf des Fahrzeugs mit der ungestörten Atmosphäre zeigte die Dominanz der fahrzeuginduzierten Turbulenz im Nahbereich. Die Spektren im Nachlauf wiesen nicht den für atmosphärische Spektren üblichen Inertialbereich auf, da in diesem Bereich Turbulenz produziert wurde. Die Abnahme der turbulenten kinetischen Energie mit zunehmender Entfernung vom Fahrzeug entsprach nicht exakt den Erwartungen aufgrund von Messungen im Windkanal.

In den letzten Jahren wurden Straßenschluchten verstärkt Ziel der numerischen Modellierung. Neben des im Vergleich zur Autobahn in ebenem Gelände ungleich komplexeren Strömungsfeldes ist es hierbei ebenso unerlässlich, die fahrzeuginduzierte Turbulenz bei Berechnung der bodennahen Immissionskonzentrationen in Form einer geeigneten Parametrisierung zu berücksichtigen. Gross (1997) stellte ein Modell vor, in dem der turbulente Diffusionskoeffizient auf der Basis von stationären Gleichungen für die turbulente kinetische Energie und die Dissipation bestimmt wird. Der fahrzeuginduzierten Turbulenz wird dabei im mechanischen Produktionsterm der turbulenten kinetischen Energie als zusätzliche Windscherung Rechnung getragen. Die Strömungsgeschwindigkeit der Luft unmittelbar über der Fahrbahn wird dafür aus der Fahrzeuggeschwindigkeit abgeschätzt. Ein Vergleich zwischen simulierten und beobachteten Konzentrationen zeigte eine zufrieden stellende Übereinstimmung. Eindeutig führten höhere Geschwindigkeiten bei gleichen Emissionen zu deutlich geringeren Konzentrationen aufgrund der zusätzlichen diffusiven Turbulenzelemente durch den Verkehr.

Karim und Matsui (1998) und Karim et al. (1998) stellten ein modifiziertes Gauß-Modell für die Ausbreitung von Fahrzeugemissionen in Straßenschluchten vor. Die fahrzeuginduzierte Turbulenz wurde in Form der Parametrisierung von Eskridge und Hunt (1979) realisiert. Die aus der Literatur bekannten Profile der Konzentrationen der bedeutendsten emittierten Substanzen konnten ungefähr reproduziert werden.

Schatzmann et al. (1999) untersuchten die Ausbreitung von Fahrzeugabgasen durch einen Vergleich von Naturdaten, Windkanalversuchen mit unterschiedlicher Detailtreue des umströmten Modells und einem numerischen Modell. Bei den Windkanalversuchen und den Modellrechnungen wurde die fahrzeuginduzierte Turbulenz noch nicht berücksichtigt. Die Autoren machten jedoch einige Vorschläge zur zukünftigen Simulation der fahrzeuginduzierten Turbulenz im Windkanal.

Eine physikalische Simulation der Straßenschlucht in einem Grenzschichtwindkanal gelang Kastner-Klein et al. (2000). Die fahrzeuginduzierte Turbulenz wurde durch kleine Plättchen, die durch das Modell der Straßenschlucht gezogen wurden, nachempfunden. Skaliert wurde das Modell durch das Verhältnis der Turbulenzproduktion durch den Wind und der Turbulenzproduktion durch die Fahrzeuge. Der Einfluss unterschiedlicher Verkehrsparameter wie Geschwindigkeit oder Verkehrsstärke auf die Felder der Konzentrationen wurde untersucht. Die wandnahen Konzentrationen nahmen dabei mit zunehmendem Verhältnis von Fahrzeug- zu Windgeschwindigkeit und mit zunehmender Verkehrsstärke ab. Es wurde ein dimensionsloser Parameter aus Verhältnis von Fahrzeug- zu Windgeschwindigkeit und Verkehrsstärke gefunden, der die Abhängigkeit der Konzentration von der fahrzeuginduzierten Turbulenz optimal beschrieb.

Henne (2001) verglich Messungen der fahrzeuginduzierten Turbulenz aus realen Straßenschluchten mit physikalischen Modellen im Windkanal. Die typische Dauer erhöhter Turbulenz nach Passage großer Fahrzeuge wie LKW konnte er auf einige wenige Sekunden quantifizieren. Der Betrag der zusätzlichen turbulenten kinetischen Energie infolge der Fahrzeuge war im Nahbereich von LKW eine Zehnerpotenz größer als im Nahbereich von PKW bei gleicher Geschwindigkeit, was die Ergebnisse von Moosmüller et al. (1998) bestätigte. Aus Analysen der spektralen Energiedichte und Wavelet-Analysen konnte der beteiligte Frequenzbereich ermittelt werden. Er betrug ca. 0,1 Hz bis 2,0 Hz.

Mit Hilfe von mikroskaligen Strömungsmodellen konnten Chan et al. (2001) und Kim et al. (2001) die Umströmung einzelner Fahrzeuge simulieren. Sehr detailliert wurde dabei die Ausbildung der Leewirbel am Fahrzeugheck untersucht. Die sofortige Vermischung der Fahrzeugemissionen auf den gesamten Bereich der Leewirbel wurde von den Autoren aufgezeigt. Dies galt ebenfalls für einen LKW mit am Dach der Fahrerkabine nach oben emittierendem Auspuffrohr.

Die Pionierarbeit auf dem Gebiet der Resuspension von Partikeln stammt von Bagnold (1941), der die Wanderung von Sanddünen infolge atmosphärischer Strömungsvorgänge

untersuchte. Die Auswirkungen von turbulenter Durchmischung und Sedimentation auf das Vertikalprofil der Konzentration von Staub und Sand werden bereits bei Lettau (1939) beschrieben. Eine der ersten Arbeiten auf dem Gebiet der Resuspension von Partikeln durch passierende Fahrzeuge geht auf Sehmel (1973) zurück. Die Motivation für diese Untersuchung bestand zum einen in der Frage, inwieweit radioaktive Partikel nach einem Störfall mit radioaktivem Niederschlag resuspendiert werden und damit wiederum eingeatmet werden können. Ein weiterer Aspekt war der Eintrag von Streusalz und dem damaligen Benzinzusatz Blei in die nähere Umgebung der Straßen, deren negativer Einfluss auf die Vegetation bereits bekannt war. Nicholson et al. (1989) brachten fluoreszierende Partikel auf eine Straße aus und ließen unter kontrollierten Bedingungen Fahrzeuge mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten durch die Partikel hindurch fahren. Die Resuspension war größer bei höherer Geschwindigkeit, bei größeren Partikeln und geringerer Feuchte. Es muss somit nicht primär die Gravitationskraft auf die Partikel sondern vielmehr die Adhäsionskraft zwischen Partikeln und Oberfläche überwunden werden, um ein Partikel in die Atmosphäre einzubringen. Ein physikalisches Modell im Labor nutzten Mollinger et al. (1993) zur Untersuchung der verkehrsbedingten Resuspension. Die Resuspension war größer, wenn die Geschwindigkeit höher war, wenn die Partikel größer waren, wenn die Rauigkeit der Fahrbahnoberfläche geringer war, wenn Widerstandsbeiwert oder Länge der Fahrzeugmodelle größer waren und wenn der Spalt zwischen Modell und Fahrbahnoberfläche, die sog. Bodenfreiheit, kleiner war. Die genannten Zusammenhänge konnten jederzeit reproduziert werden, während der absolute Anteil der resuspendierten Masse von Tag zu Tag bei gleichen experimentellen Bedingungen signifikant variierte. Die Autoren vermuteten daher einen weiteren wichtigen Parameter, sehr wahrscheinlich handelt es sich dabei um die Luftfeuchte.

Eine große Anzahl neuerer Arbeiten setzt sich mit Messung, Nachweis, Quellzuordnung und Quantifizierung von Abrieb- und Aufwirbelungspartikeln aus dem Straßenverkehr auseinander. In der Literatur hat sich für den Anteil der Massendichte von Partikeln mit einem Durchmesser kleiner als  $x \mu\text{m}$  die Bezeichnung  $\text{PM}_x$  durchgesetzt, von der im Folgenden in dieser Arbeit ebenfalls Gebrauch gemacht wird. Auf das Maximum der Größenverteilung des verkehrsbedingten Grobstaubs bei  $20 \mu\text{m}$  weist Schultz (1994a) hin, der einen Teil des Aerosols an Straßen als Reifenabrieb identifizieren konnte (Schultz 1994b). Claiborn et al. (1995), Kantamaneni et al. (1996) und Venkatram et al. (1999) konnten durch Konzentrations- und Windmessungen auf beiden Seiten verschiedener Straßen Emissionsfaktoren für nicht asphaltierte Straßen ( $\approx 200 \text{ g km}^{-1}$ ), schwach befahrene asphaltierte Straßen ( $\approx 5 \text{ g km}^{-1}$ ) und Autobahnen ( $\approx 0,1$  bis  $1 \text{ g km}^{-1}$ ) angeben. Für kalifornische Verhältnisse quantifizierten



Eldering und Cass (1996) und Kleeman und Cass (1998) die Aerosolemissionen aller bekannten Quellen für PM<sub>10</sub>, PM<sub>2.5</sub> und PM<sub>1</sub> und stellten fest, dass sowohl beim PM<sub>10</sub> als auch beim PM<sub>2.5</sub> die Staubemission von asphaltierten Straßen die bedeutendste Quelle darstellte. Die amerikanische Umweltbehörde reagierte mit dem Versuch der Formulierung einer einfachen, praxistauglichen Formel für die Bestimmung der Emissionen von Straßenstaub (U.S. EPA 1997), die von Venkatram (2000), Düring und Lohmeyer (2001) und Kuhns et al. (2001) umfassend kritisiert wurde. Der Beitrag des Reifen- und Bremsenabriebs zur Rußemission an Straßen wurde von Rauterberg-Wulff (1998) untersucht. Die Emissionsfaktoren durch Reifen- und Bremsenabrieb in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit quantifizierten Warner et al. (2002). Auf die Zunahme der Konzentrationen von Platin und ähnlichen Elementen in der Umwelt als Folge der Katalysatoreinführung weisen Schäfer et al. (1999) hin. Der Anteil des Straßenverkehrs an den PM<sub>10</sub>- und PM<sub>2.5</sub>-Immissionskonzentrationen an Straßen in der Schweiz wurde von Hüglin und Gehrig (2000) zu ca. 50% bzw. ca. 30% quantifiziert. Das Vorhandensein einer Quelle von sowohl groben als auch feinen Partikeln konnten Hitchins et al. (2000) und Imhof et al. (2002) anhand von Konzentrationsmessungen an Straßen nachweisen. Eine Proportionalität zwischen den Konzentrationen grober Partikel und NO<sub>x</sub> an Straßen konnten in England Harrison et al. (2001) und in Finnland Kukkonen et al. (2001) messen. Einen linearen Zusammenhang zwischen der Konzentration grober Partikel und der Verkehrsstärke wiesen Ruellan und Cachier (2001) an einer Stadtautobahn in Paris nach. Im Raum Köln konnte Weckwerth (2001) anhand der Anteile verschiedener Metalle im feinen und groben Aerosol an unterschiedlichen Messstellen diverse Quellen identifizieren, darunter Reifenabrieb, Abrieb von Bremsbelägen, Dieselruß und Abrieb von Straßenbahnoberleitungen und -schienen. Pakkanen et al. (2001) in Helsinki und Salma et al. (2002) in Budapest entdeckten einen großen Einfluss des Verkehrs auf die Größenverteilungen verschiedener Komponenten des Aerosols an städtischen Messstellen besonders im Bereich der groben Partikel. Sehr hohe Staubkonzentrationen mit ca. 1000 µg m<sup>-3</sup> infolge der Resuspension registrierten Kumar et al. (2001) an zwei Straßenkreuzungen in Mumbai, Indien. Eine umfangreiche Zusammenstellung der Partikelemissionsfaktoren für die drei Quelltypen Reifenabrieb, Bremsenabrieb und Straßenabrieb findet man bei Lükewille et al. (2001), die im Vergleich zu den aus dem Verbrennungsprozess herrührenden Partikelemissionsfaktoren keinesfalls zu vernachlässigen sind (Ntziachristos und Samaras 2001). Auch Legret und Pagotto (1999), Namdeo et al. (1999), Jaecker-Voirol und Pelt (2000), Lenschow et al. (2001), Abu-Allaban et al. (2002), Tiitta et al. (2002) und Manoli et al. (2002) gelangten zu dem Ergebnis, dass mehr Partikelmasse durch Abriebprozesse und Resuspension

in die Atmosphäre eingebracht wird als durch den Verbrennungsprozess in den Fahrzeugmotoren.

Partikelemissionsfaktoren aus Messungen in Straßentunneln liegen bei großer Streuung zumeist unter den Werten aus Freilandmessungen (Gillies et al. 2001; Puxbaum et al. 2002; Sternbeck et al. 2002), da die Bedeutung von Abrieb und Resuspension in Tunneln geringer ist.

## 2 Das Modellsystem

Für die vorliegende Arbeit ist das am Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH) und des Forschungszentrums Karlsruhe entwickelte und oftmals mit Erfolg eingesetzte Modellsystem bestehend aus dem Strömungsmodell KAMM (Karlsruher Atmosphärisches Mesoskaliges Modell, Adrian und Fiedler 1991), dem dreidimensionalen Ausbreitungsmodell DRAIS (Dreidimensionales Regionales Ausbreitungs- und Immissions-Simulationsmodell, Tangermann Dlugi 1982, Tangermann-Dlugi und Fiedler 1983, Nester et al. 1987, Vogel et al. 1995) und einem auf dem Gasphasenmechanismus des RADM2-Modells basierenden Chemiemodell (Stockwell et al. 1990; Hass 1991) verwendet worden. Mit diesem Modellsystem kann die zeitliche und räumliche Entwicklung sowohl wichtiger atmosphärischer Parameter wie z.B. der Temperatur und Feuchte als auch der Konzentrationsverteilungen verschiedener auch reaktiver Luftbeimengungen simuliert werden. Beispiele für diverse aktuelle Anwendungen des Modellsystems sind Fragestellungen wie die Simulation von Ozonkonzentrationen und Photosmog und die Beurteilung von Emissionsminderungsmaßnahmen (Vogel 1991; Vogel et al. 1997; Fiedler 2000; Fiedler und Friedrich 2001; Hammer 2001), die Quantifizierung des Einflusses von Land-See-Windsystemen auf die Konzentrationsverteilungen von Luftbeimengungen (Nester 1995), die Modellierung von Transport- und Diffusionsprozessen in stark gegliedertem Gelände (Fiedler et al. 2000) oder die Simulation von mesoskaligen Aerosolverteilungen (Riemer 2002). Im Folgenden wird ein Überblick über das Modellsystem gegeben.

### 2.1 Das Strömungsmodell

Bei dem Strömungsmodell KAMM handelt es sich um ein nicht-hydrostatisches Atmosphärenmodell. Bei den vorliegenden Simulationen wurde es in einer eindimensionalen Version verwendet. Unter der Voraussetzung der horizontalen Homogenität des Untergrundes bzgl. Topographie und Landnutzung werden die Vertikalprofile sämtlicher meteorologischer Größen berechnet. Alle auftretenden Variablen sind daher nur noch Funktionen der Höhe  $z$  und der Zeit  $t$ .

## Die Grundgleichungen

Physikalische Grundlage des Modells sind die Gleichungen für die Impulserhaltung und die Massenerhaltung, der erste Hauptsatz der Thermodynamik sowie die Bilanzgleichung für den Wasserdampf. KAMM basiert somit auf dem folgenden prognostischen Gleichungssystem:

- Die Bewegungsgleichung:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p - 2\vec{\Omega} \times \vec{v} - \nabla\Phi + \vec{R}. \quad (2.1)$$

- Die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho\vec{v} = 0. \quad (2.2)$$

- Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik:

$$\frac{d\Theta}{dt} = q_T. \quad (2.3)$$

- Die Bilanzgleichung für den Wasserdampf:

$$\frac{ds}{dt} = q_s. \quad (2.4)$$

Entsprechend der üblichen Nomenklatur in der Meteorologie ist  $\vec{v}$  der Windgeschwindigkeitsvektor,  $p$  der Druck,  $\vec{\Omega}$  die Winkelgeschwindigkeit der Erde,  $\Phi$  das Geopotential,  $\rho$  die Dichte der Luft,  $\Theta$  die potentielle Temperatur,  $s$  die spezifische Feuchte und  $\vec{R}$  die viskose Reibungskraft, die vernachlässigt werden kann.  $q_T$  repräsentiert die Divergenz von Strahlungsflüssen und Phasenumwandlungen,  $q_s$  die Feuchteänderungen aufgrund von Phasenumwandlungen.

Darüber hinaus werden folgende diagnostische Gleichungen benötigt:

- Die Gasgleichung für ideale Gase:

$$p = \rho RT. \quad (2.5)$$

- Die Definitionsgleichung der potentiellen Temperatur:

$$\Theta = T \left( \frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}}. \quad (2.6)$$

- Die Exner-Funktion:

$$\Pi = \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R}{c_p}}. \quad (2.7)$$

$R$  ist die individuelle Gaskonstante,  $p_0$  der Normaldruck und  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität für trockene Luft bei konstantem Druck. Mit Hilfe der Exner-Funktion wird die höhenabhängige Luftdichte eliminiert.

Die Kontinuitätsgleichung wird ersetzt durch die Filterbedingung für flache Konvektion:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0. \quad (2.8)$$

Der Begründung hierfür liegt in der Filterung der Schallwellen. Diese haben nur eine sehr untergeordnete meteorologische Bedeutung, bereiten jedoch bei der Integration des Differentialgleichungssystems Probleme. Nach dieser Filteroperation werden Schallwellen mit dem Gleichungssystem nicht mehr beschrieben.

Auf das prognostische Gleichungssystem (2.1), (2.2), (2.3) und (2.4) wird die Reynolds-Mittelung angewendet. Jede Größe  $\Upsilon = \vec{v}, \Theta, s, q_T, q_s, \Pi$  wird in einen Ensemblemittelwert  $\bar{\Upsilon}$  und eine turbulente Fluktuation  $\Upsilon'$  aufgespalten:

$$\Upsilon = \bar{\Upsilon} + \Upsilon'. \quad (2.9)$$

Die so behandelten Variablen werden in die Gleichungen eingesetzt und diese dann anschließend gemittelt. Alle Variablen werden in einen großräumigen Referenzzustand (G) und eine lokale Abweichung (\*) zerlegt:

$$\Theta = \Theta_G + \Theta^*, \quad (2.10)$$

$$\Pi = \Pi_G + \Pi^*. \quad (2.11)$$

Der Referenzzustand soll sowohl geostrophisch als auch hydrostatisch sein und muss daher dem folgenden Gleichungssystem genügen:

$$\frac{\partial \Pi_G}{\partial x} = + \frac{f_c v_g}{\Theta_G c_p}, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial \Pi_G}{\partial y} = - \frac{f_c u_g}{\Theta_G c_p}, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \Pi_G}{\partial z} = - \frac{g}{\Theta_G c_p}. \quad (2.14)$$

Dabei ist  $g$  die Schwerebeschleunigung und  $f_c = 2|\vec{\Omega}| \sin \varphi$  der Coriolisparameter mit der geographischen Breite  $\varphi$ . Die Komponenten des geostrophischen Windes  $u_g$  und  $v_g$  sind über den horizontalen Druckgradienten definiert:

$$u_g = - \frac{1}{\rho f_c} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} = - \frac{c_p \Theta_G}{f_c} \frac{\partial \Pi_G}{\partial y}, \quad (2.15)$$

$$v_g = + \frac{1}{\rho f_c} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} = + \frac{c_p \Theta_G}{f_c} \frac{\partial \Pi_G}{\partial x}. \quad (2.16)$$

In der vorliegenden Arbeit werden horizontal homogene Verhältnisse vorausgesetzt, es sollen keine Effekte durch Orographie oder durch Variationen in der Rauigkeit berücksichtigt werden. Die mittlere Vertikalgeschwindigkeit und alle Differentiationen nach den horizontalen Koordinaten  $x$  und  $y$  mit Ausnahme des horizontalen Druckgradienten sind gleich null. Aus der Kontinuitätsgleichung (2.8) folgt bei horizontaler Homogenität, dass  $\bar{w}$  an jeder Stelle im Raum gleich null ist. Die dritte Bewegungsgleichung entfällt somit. Der Reibungsterm  $\vec{R}$  der Bewegungsgleichung (2.1) wird gegenüber den turbulenten Flüssen vernachlässigt. Daher vereinfachen sich die Bewegungsgleichungen und die prognostische Gleichung für die potentielle Temperatur zu:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \overline{u'w'} + f_c \left( \bar{v} - \frac{\bar{\Theta}}{\Theta_G} v_g \right), \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \overline{v'w'} - f_c \left( \bar{u} - \frac{\bar{\Theta}}{\Theta_G} u_g \right), \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \overline{\Theta'w'}. \quad (2.19)$$

Dieses gekoppelte, nichtlineare Differentialgleichungssystem ist nicht geschlossen, da keine zusätzlichen Gleichungen für die Korrelationsterme  $\overline{u'w'}$ ,  $\overline{v'w'}$  und  $\overline{\Theta'w'}$  bereitgestellt werden können. Diese Ausdrücke beschreiben die durch turbulente Diffusion hervorgerufenen Vertikalflüsse von Impuls und Temperatur. Die große Bedeutung dieser Korrelationsterme in atmosphärischen Strömungen ist bei Fiedler (1975) dokumentiert.

## Die Schließung

Im mesoskaligen Strömungsmodell KAMM wird eine Schließung erster Ordnung angewendet. Schließungen höherer Ordnung führen zu vielen vorzugebenden Parametern, über die in der Atmosphäre i. a. noch nicht genug bekannt ist. Die Parametrisierung der turbulenten Flüsse erfolgt in KAMM durch den zum molekularen Fluss analog formulierten Gradientansatz, der oftmals auch als K-Ansatz bezeichnet wird:

$$\overline{w'\Upsilon'} = -K_\Upsilon \frac{\partial}{\partial z} \bar{\Upsilon}. \quad (2.20)$$

Während bei molekularen Vorgängen die kinematische Viskosität ausschließlich eine Stoffeigenschaft darstellt, ist der turbulente Diffusionskoeffizient  $K_\Upsilon$  eine vom Strömungszustand abhängige Größe, d.h. er ist eine Funktion in Raum und Zeit.

Innerhalb der Prandtl-Schicht treten große vertikale Gradienten der Windgeschwindigkeit, Temperatur und spezifischen Feuchte auf. Die Diffusionskoeffizienten für den

Austausch von Impuls  $K_m$  und Wärme  $K_h$  berechnen sich unter Verwendung der Profilkfunktionen von Businger et al. (1971) und Fiedler (1972) aus:

$$K_m = \frac{\kappa u_* z}{\Phi_m}, \quad (2.21)$$

$$K_h = \frac{\kappa u_* z}{\Phi_h}. \quad (2.22)$$

$u_*$  bezeichnet die Schubspannungsgeschwindigkeit,  $\kappa = 0,4$  die von-Karman-Konstante. Die Profilkfunktionen für Impuls  $\Phi_m$  und Wärme  $\Phi_h$  sind stabilitätsabhängig. Sie lauten im stabilen Fall ( $\zeta > 0$ ):

$$\Phi_m = 1 + 6 \zeta e^{-0,19 \zeta}, \quad (2.23)$$

$$\Phi_h = 1 + 7,8 \zeta. \quad (2.24)$$

Das Stabilitätsmaß  $\zeta$  ist über die Monin-Obuchow'sche Stabilitätslänge  $L_*$  definiert:

$$\zeta = \frac{z}{L_*}, \quad (2.25)$$

$$L_* = \frac{\overline{\Theta} u_*^2}{\kappa g \Theta_*}. \quad (2.26)$$

$\Theta_*$  ist eine charakteristische potentielle Temperatur. Bei labiler Schichtung ( $\zeta \leq 0$ ) werden folgende Profilkfunktionen verwendet:

$$\Phi_m = (1 - 19,3 \zeta)^{-0,25}, \quad (2.27)$$

$$\Phi_h = (1 - 12 \zeta)^{-0,5}. \quad (2.28)$$

Bei stabiler Schichtung wird auch oberhalb der Prandtl-Schicht eine lokale Schließung verwendet, d. h. die Diffusionskoeffizienten sind Funktionen lokaler Gradienten der Windgeschwindigkeit und der Temperatur (Fiedler 1972):

$$K_m = \frac{l^2}{\Phi_m^2} D, \quad (2.29)$$

$$K_h = \frac{l^2}{\Phi_h^2} Pr D. \quad (2.30)$$

Die Profilkfunktionen  $\Phi_m$  und  $\Phi_h$  werden wie in der Prandtl-Schicht nach Gleichungen (2.23) und (2.24) berechnet, wobei jedoch  $\zeta$  hier durch die Richardson-Zahl  $Ri$  ersetzt wird:

$$\zeta = Ri = \frac{g \frac{\partial \overline{\Theta}}{\partial z}}{\overline{\Theta} D^2}. \quad (2.31)$$

Die Mischungsweglänge  $l$  wird durch den Ansatz von Blackadar (1962) bestimmt:

$$l = \frac{\kappa z}{1 + \frac{\kappa z}{l_\infty}} \quad \text{mit} \quad l_\infty = 0,0009 \frac{u_*}{f_c}. \quad (2.32)$$

Die Deformation des Strömungsfeldes ist definiert als:

$$D = \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)^2}. \quad (2.33)$$

Für die turbulente Prandtl-Zahl  $Pr$  gilt:

$$Pr = \frac{\Phi_h}{\Phi_m}. \quad (2.34)$$

Bei konvektiven Bedingungen liefert das beschriebene Konzept jedoch deutlich zu geringe Diffusionskoeffizienten, da sich dann in der Atmosphäre relativ schwache Gradienten einstellen. Die Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_*$  ist unter diesen Bedingungen kein geeigneter Parameter zur Beschreibung der turbulenten Diffusion mehr. Daher wird bei labiler Schichtung auf eine nicht-lokale Schließung zurückgegriffen. Als Längenskala wird dabei die Grenzschichthöhe  $z_i$ , als Geschwindigkeitskala der konvektive Geschwindigkeitsmaßstab  $w_*$  verwendet.

$$w_* = \left( \frac{-gz_i u_* \Theta_*}{\bar{\Theta}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.35)$$

Die Grenzschichthöhe  $z_i$  wird nach einer prognostischen Gleichung (Deardorff 1973) berechnet. Neben den Geschwindigkeitsmaßen  $u_*$  und  $w_*$  gehen die bodennahe Lufttemperatur  $\Theta_0$  und der Temperaturgradient oberhalb der Grenzschicht  $\gamma = \frac{\partial \Theta^+}{\partial z}$  ein:

$$\frac{\partial z_i}{\partial t} = \frac{1,8(w_*^3 + 1,1 u_*^3 - 3,3 u_*^2 f_c z_i)}{g \frac{z_i^2}{\Theta_0} \gamma + 9 w_*^2 + 7,2 u_*^2}. \quad (2.36)$$

Vogel und Emeis (1990) testeten verschiedene Methoden zur Bestimmung der Diffusionskoeffizienten und wählten eine Formulierung von Degrazia (1989), die auf einer Publikation von Fiedler (1969) aufbaut, aus. Die Diffusionskoeffizienten basieren demnach auf einer Ähnlichkeitshypothese für das Varianzspektrum der turbulenten kinetischen Energie.  $K_h$  und  $K_m$  berechnen sich dann aus:

$$K_h = 0,15 w_* z_i \Psi^{\frac{1}{3}} q_i^{-\frac{4}{3}}, \quad (2.37)$$

$$K_m = Pr K_h. \quad (2.38)$$

Die dimensionslose Dissipationsrate  $\Psi$  und die Ähnlichkeitsfunktion für das Energiedichtespektrum  $q_i$  geben das Vertikalprofil der Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit



von der dimensionslosen Höhe  $\frac{z}{z_i}$  an. Ihre Bestimmung erfolgte aus beobachteten Spektren der turbulenten kinetischen Energie.

$$\Psi = \left(136 \frac{z}{z_i}\right)^{-1} \left( \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 + 0,75 \left(136 \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (2.39)$$

$$q_i = \left(1 - \exp\left(-4\frac{z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(8\frac{z}{z_i}\right)\right)^{-1}. \quad (2.40)$$

Als Schichtungsmaß wird  $\Theta_*$  verwendet. Bei negativem  $\Theta_*$  erfolgt die Schließung nach Degrazia.

### Die Randbedingungen

In der eindimensionalen Version des Strömungsmodells KAMM sind Randbedingungen für die obere und untere Berandung erforderlich.

Der Modellunterrand wird durch die Rauigkeitslänge  $z_0$  vorgegeben. Auf dieser physikalischen Begrenzungsfläche gilt für jede Windkomponente die Haftbedingung:

$$\bar{u} = 0, \quad (2.41)$$

$$\bar{v} = 0. \quad (2.42)$$

Die potentielle Temperatur und die spezifische Feuchte werden über eine Interfacebeziehung aus den Werten an der Erdoberfläche bestimmt. Dabei wird angenommen, dass Temperatur- und Feuchtegradienten zwischen Erdoberfläche und der Höhe  $z_0$  nur durch entsprechende Flüsse in der viskosen Unterschicht charakterisiert werden. Die Temperatur und die spezifische Feuchte am Erdboden werden aus einem angekoppelten Boden-Vegetations-Modell (Schädler 1990) erhalten.

Der Modelloberrand befindet sich in den vorliegenden Modellrechnungen bei  $z = 3000$  m. In dieser Höhe werden die Windkomponenten gleich den geostrophischen Windkomponenten gesetzt, die über den horizontalen Druckgradienten definiert sind. Temperatur und Feuchte bleiben am Modelloberrand zeitlich konstant und entsprechen den Werten des Referenzzustands. Die Gleichungen werden numerisch integriert. In der Vertikalen wird ein numerisches Gitter mit variabler Maschenweite verwendet. Auf die Gitterstruktur wird in Kapitel 2.2.4 detaillierter eingegangen.

## 2.2 Das Ausbreitungsmodell

Parallel zum Strömungsmodell KAMM berechnet das Ausbreitungsmodell DRAIS (Tangermann Dlugi 1982, Tangermann-Dlugi und Fiedler 1983, Nester et al. 1987, Vogel et al. 1995) die räumliche und zeitliche Verteilung von gasförmigen Luftbeimengungen. Basis hierfür bilden die mit KAMM berechneten horizontal homogenen aber vertikal und zeitlich variierenden meteorologischen Größen. Für die vorliegende Fragestellung der senkrecht angeströmten Autobahn reicht unter Ausnutzung der Symmetrie zur Linienquelle eine zweidimensionale Betrachtungsweise. Zur Berechnung der Konzentrationsfelder muss die Diffusionsgleichung numerisch gelöst werden.

### 2.2.1 Die Diffusionsgleichung

Grundlage der Ausbreitungsrechnung ist die Massenerhaltungsgleichung unter Berücksichtigung chemischer Umwandlungen, in der Literatur oftmals auch Diffusionsgleichung genannt. In DRAIS wird diese Gleichung für das Volumenmischungsverhältnis von Substanzen gelöst:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (c_i \vec{v}) + P_i - L_i + Q_i. \quad (2.43)$$

Es sind  $c_i$  die Konzentration der Substanz  $i$  im Sinne eines Volumenmischungsverhältnisses,  $P_i$  der Gewinn und  $L_i$  der Verlust der Substanz  $i$  infolge chemischer Reaktionen,  $Q_i$  die Konzentrationsänderung infolge von Emissionen, hier die eines Autobahnabschnitts. Details über die Unterschiede bei der Anwendung der Diffusionsgleichung für Volumenmischungsverhältnisse und für Partialdichten findet man bei van Dop (1998), Venkatram (1993) und Thomson (1995). In Analogie zu der Behandlung der Grundgleichungen im Strömungsmodell wird die Reynoldsmittelung angewendet. Mit dem Gradientansatz für die turbulenten Flüsse und der Berücksichtigung der Symmetrie entlang der Linienquelle erhält man die folgende zweidimensionale Form der Diffusionsgleichung:

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} K_{xx} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} K_{zz} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} + \bar{P}_i - \bar{L}_i + \bar{Q}_i. \quad (2.44)$$

Die chemischen Produktions- und Verlustterme  $\bar{P}_i$  und  $\bar{L}_i$  werden mit dem Chemiemodell berechnet (s. Kap. 2.3).  $K_{xx}$  und  $K_{zz}$  bezeichnen die horizontalen bzw. vertikalen

turbulenten Diffusionskoeffizienten. Bei der vorliegenden Problemstellung der Ausbreitung von Schadstoffen von einer Autobahn hängen sie nicht nur von einer Vielzahl von meteorologischen Parametern ab. Zusätzlich führt die sehr große fahrzeuginduzierte Turbulenz im Nahbereich der Fahrbahnen zu einer starken Intensivierung der turbulenten Diffusion. Des Weiteren stellt die typische Autobahn wegen ihrer Lage auf einem Damm geringer Höhe und ihren durchgehenden Leitplanken ein Strömungshindernis dar, was ebenfalls zu einer Produktion von Turbulenz führt. Die Diffusionskoeffizienten setzen sich daher aus einem atmosphärischen Anteil  $K_{xx}^{Atm.}(x, z)$  bzw.  $K_{zz}^{Atm.}(x, z)$  und einem autobahninduzierten Anteil  $K_{xx}^{AB}(x, z)$  bzw.  $K_{zz}^{AB}(x, z)$  zusammen (Danard 1972; Eskridge et al. 1979):

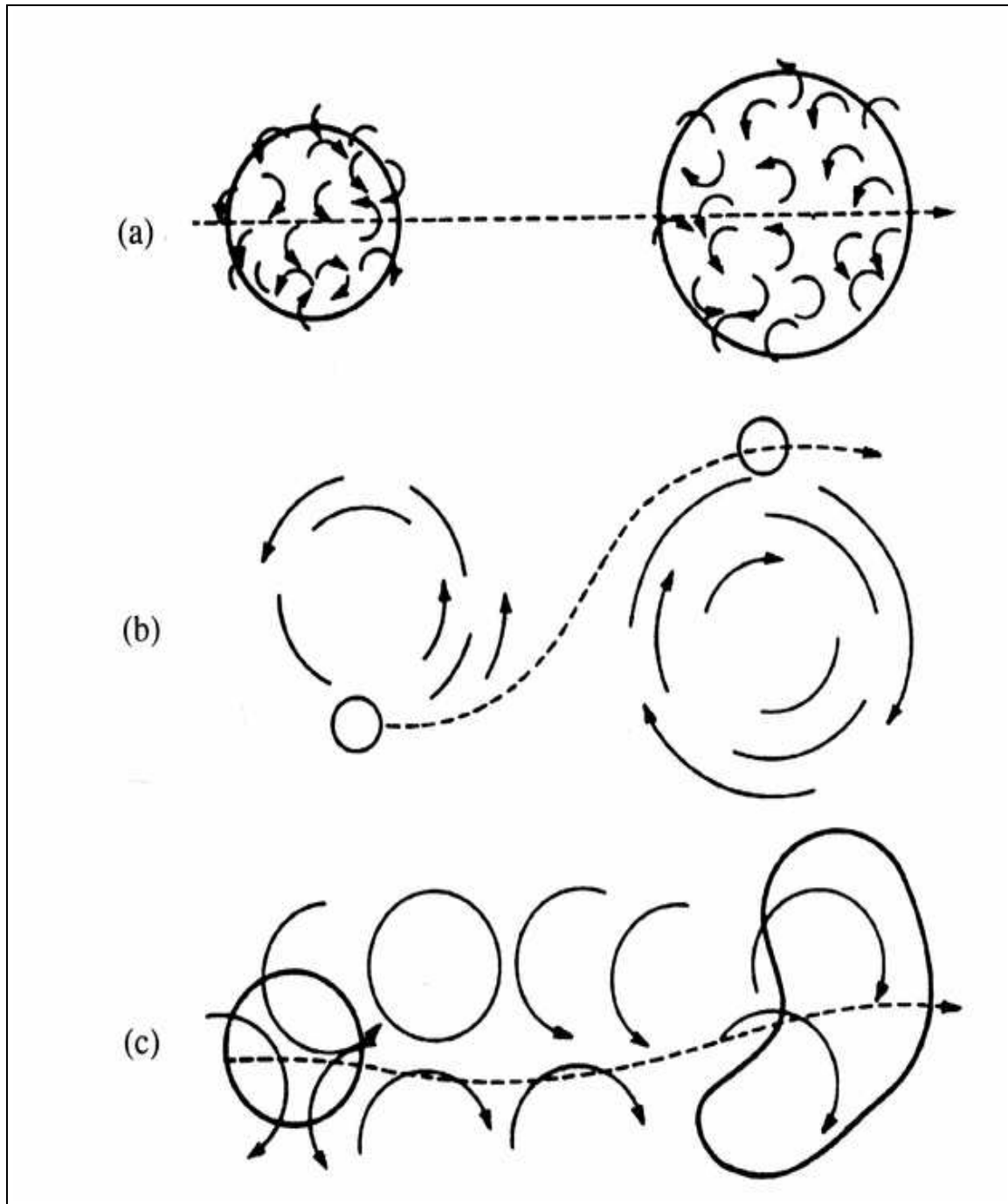
$$K_{xx}(x, z) = K_{xx}^{AB}(x, z) + K_{xx}^{Atm.}(x, z), \quad (2.45)$$

$$K_{zz}(x, z) = K_{zz}^{AB}(x, z) + K_{zz}^{Atm.}(x, z). \quad (2.46)$$

Neben der Höhe  $z$  bestimmen die meteorologischen Größen Windgeschwindigkeit  $\vec{v}$ , Windscherung  $\frac{\partial \vec{v}}{\partial z}$  und thermische Schichtung  $\frac{\partial \Theta}{\partial z}$ , aber insbesondere auch die Ausbreitungszeit  $\tau$  bzw. die Quellentfernung  $x_q$  die atmosphärischen Diffusionskoeffizienten  $K_{xx}^{Atm.}(x, z)$  und  $K_{zz}^{Atm.}(x, z)$ , siehe Kapitel 2.2.2. Die autobahninduzierten Anteile des Diffusionskoeffizienten  $K_{xx}^{AB}(x, z)$  und  $K_{zz}^{AB}(x, z)$  werden durch eine weitere im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Parametrisierung zur Verfügung gestellt, die in Kapitel 3 beschrieben ist.

### 2.2.2 Die quellentfernungsabhängige Schließung

Da der Nahbereich der Autobahn in der vorliegenden Untersuchung möglichst gut aufgelöst werden soll, muss der Diffusionskoeffizient quellentfernungsabhängig parametrisiert werden. Dies rührt daher, dass mit zunehmender Ausbreitungszeit die Abgasfahne ein immer größeres Volumen einnimmt, und somit immer größere Turbulenzwirbel am Diffusionsvorgang teilnehmen können. Somit müssen auch die atmosphärischen Diffusionskoeffizienten eine Funktion der Quellentfernung sein. Abbildung 2.1 zeigt anschaulich drei verschiedene Fälle der turbulenten Ausbreitung. Im Fall (a) sind die turbulenten Wirbel kleiner als ein betrachtetes Luftpaket, das zum Beispiel aus einem emittierten Schadgas bestehen könnte. Die Diffusion ist in dann nicht sehr effektiv und das Luftpaket wird nur langsam an Volumen zunehmen. Wenn die Turbulenzwirbel sehr viel größer als das Luftpaket sind, tritt kaum turbulente Diffusion sondern vielmehr eine mäandernde Bewegung des Luftpakets auf (b). Am effektivsten



**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der Diffusion eines Luftpakets unter drei verschiedenen Turbulenzbedingungen: Das Luftpaket befindet sich in einem Feld, in dem die Turbulenzwirbel kleiner als das Luftpaket (a), größer als das Luftpaket (b) oder etwa gleich groß wie das Luftpaket (c) sind (Seinfeld und Pandis 1998).

ist hingegen die turbulente Diffusion, wenn die Wirbel und das Luftpaket von ähnlicher Größe sind (c). Bei einem atmosphärischen Ausbreitungsvorgang können somit mit zunehmender Quellentfernung, d.h. mit zunehmender Ausbreitungszeit und damit größerem Schadstoffvolumen immer größere Turbulenzelemente am Diffusionsprozess teilnehmen. Wenn in einer bestimmten Quellentfernung die größten existierenden Wirbel beteiligt sind, nimmt die Diffusion und damit der Diffusionskoeffizient mit einer weiteren Zunahme der Entfernung nicht mehr zu sondern bleibt konstant. Basierend auf der Diffusionstheorie von Taylor (1921) und spektralen Gleichungen für die turbulenten Geschwindigkeitskomponenten gelang es Degrazia (1989), Formulierungen für quellentfernungsabhängige Diffusionskoeffizienten abzuleiten. Grundlage dieser Parametrisierung ist die statistische Theorie der Turbulenz, die ausführlich in einer Arbeit von Fiedler (1969) dargestellt ist. Im Folgenden werden die Grundzüge der Herleitung am Beispiel des vertikalen Diffusionskoeffizienten  $K_{zz}^{Atm.}$  exemplarisch dargestellt.

In einem Lagrange'schen Referenzsystem, in dem sich der Beobachter mit dem Teilchen mitbewegt, lässt sich das Taylor-Theorem herleiten. Es gibt einen Zusammenhang zwischen der Streuung  $\sigma_z^2(t)$ , die die mittlere quadratische Abweichung eines Teilchens von der Hauptstromrichtung darstellt, der Varianz der vertikalen Windkomponente  $\sigma_w^2$  und der Lagrange'schen Korrelationsfunktion  $R_{L,w}(\tau)$  an:

$$\sigma_z^2(t) = \sigma_w^2 \int_0^t \int_0^{t'} R_{L,w}(\tau) d\tau dt \quad (2.47)$$

$$\text{mit } R_{L,w}(\tau) = \frac{\overline{w'(t) w'(t + \tau)}}{\overline{w'^2(t)}}. \quad (2.48)$$

Des Weiteren besteht folgender Zusammenhang zwischen Korrelationsfunktion und turbulentem Energiedichtespektrum  $S_{L,w}(f)$ , wobei  $f$  die Frequenz ist (Taylor 1938):

$$R_{L,w}(\tau) = \int_0^\infty S_{L,w}(f) \cos 2\pi f t df. \quad (2.49)$$

Für die Relation zwischen Euler'scher und Lagrange'scher Korrelationsfunktion schlugen Hay und Pasquill (1959) vor:

$$R_{L,w}(\beta_w t) = R_{E,w}(t). \quad (2.50)$$

Kofoed-Hansen (1967) erkannte die Stabilitätsabhängigkeit des Faktors  $\beta_w$ :

$$\beta_w = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{\bar{u}}{\sigma_w}. \quad (2.51)$$

Aus den Gleichungen (2.47), (2.49), (2.50) und (2.51) konnten Hay und Pasquill (1959) und Pasquill und Smith (1983) einen Zusammenhang zwischen der Streuung  $\sigma_z^2(t)$  und dem Euler'schen Spektrum der turbulenten Vertikalgeschwindigkeiten  $S_w(f)$  herleiten:

$$\sigma_z^2 = \sigma_w^2 t^2 \int_0^\infty S_w(f) \left( \frac{\sin(f\pi t/\beta_w)}{f\pi t/\beta_w} \right)^2 df. \quad (2.52)$$

Aus dem Vergleich von Lösungen der Diffusionsgleichung unter vereinfachten Bedingungen im Lagrange'schen und im Euler'schen System, in dem die turbulenten Flüsse über einen Gradientansatz parametrisiert wurden, gelang es Batchelor (1949), den vertikalen Diffusionskoeffizient  $K_{zz}^{Atm.}$  und die Streuung in Bezug zu setzen:

$$K_{zz}^{Atm.}(\tau) = \frac{d}{d\tau} \left( \frac{1}{2} \sigma_z^2(\tau) \right). \quad (2.53)$$

Zur quellentfernungsabhängigen Formulierung der Diffusionskoeffizienten werden nun noch Spektren der turbulenten kinetischen Energie benötigt. Die in der Atmosphäre auftretenden Turbulenzelemente erstrecken sich immer über mehrere Größenordnungen. Eingespeist wird die Energie dabei im Bereich der großen Wirbel, dem so genannten Produktionsbereich. Die Energie wird im Weiteren in immer kleinere Strukturen transferiert, bis sie in sehr kleinen Wirbeln dissipiert, d.h. in Wärme umgewandelt wird. Beispiele für Spektren der turbulenten Windgeschwindigkeitskomponenten findet man in Kapitel 3.2.1. Spektren gehorchen Ähnlichkeitsgesetzen und lassen sich als Funktionen weniger atmosphärischer Parameter angeben. Degrazia (1989) gibt für das vertikale und das laterale Turbulenzspektrum in der konvektiven Grenzschicht folgende Formulierungen an:

$$\frac{S_w(f)}{w_*^2 \Psi^{\frac{2}{3}}} = \frac{1,8 \frac{z_i}{u q_i}}{\left(1 + 2,7 \frac{f z_i}{u q_i}\right)^{\frac{5}{3}}}, \quad (2.54)$$

$$\frac{S_v(f)}{w_*^2 \Psi^{\frac{2}{3}}} = \frac{1,533 \frac{z_i}{u}}{\left(1 + 2,3 \frac{f z_i}{u}\right)^{\frac{5}{3}}}. \quad (2.55)$$

$\Psi$  und  $q_i$  geben die durch Gleichungen (2.39) und (2.40) beschriebenen Profilkfunktionen an. Im Gegensatz zum lateralen Spektrum  $S_v$  ist das vertikale Spektrum  $S_w$  höhenabhängig. Diese Höhenabhängigkeit tritt insbesondere in Bodennähe in Erscheinung, da hier Vertikalbewegungen durch den festen Boden behindert werden.

Durch Verknüpfen der Gleichungen (2.52), (2.53) und (2.54) und Vereinfachung des erhaltenen Integralausdrucks erhielt Degrazia nach einer Variablentransformation Ausdrücke für den vertikalen und durch analoges Vorgehen ebenfalls für den horizontalen

Diffusionskoeffizienten:

$$K_{xx}^{Atm.} = w_* z_i \frac{0,1X}{0,3+X}, \quad (2.56)$$

$$K_{zz}^{Atm.} = w_* z_i \frac{0,15 \left(\frac{\Psi}{q_i}\right)^{\frac{2}{3}} X}{0,284 + (\Psi q_i^2)^{\frac{1}{3}} X}. \quad (2.57)$$

$X$  ist die dimensionslose Quellentfernung. Es gilt:

$$X = \frac{w_* x_q}{\bar{u} z_i}. \quad (2.58)$$

$x_q$  ist die tatsächliche Entfernung zur Quelle. Die Profildfunktionen  $\Psi$  und  $q_i$  sind gemäß Gleichungen (2.39) und (2.40) abhängig von der dimensionslosen Höhe  $\frac{z}{z_i}$ . Daher ist auch infolge der Inhomogenität der vertikalen Turbulenz der vertikale Diffusionskoeffizient  $K_{zz}^{Atm.}$  eine Funktion der Höhe  $z$ . Aufgrund der Homogenität der lateralen Turbulenz ist der horizontale Diffusionskoeffizient  $K_{xx}$  unabhängig von der Höhe  $z$ :

$$K_{xx}^{Atm.} = K_{xx}^{Atm.}(w_*, z_i, x_q, \bar{u}), \quad (2.59)$$

$$K_{zz}^{Atm.} = K_{zz}^{Atm.}(w_*, z_i, x_q, \bar{u}, z). \quad (2.60)$$

Für sehr große Quellentfernungen ( $X \rightarrow \infty$ ) geht  $K_{zz}^{Atm.}$  in  $K_h$  (vgl. Gl. (2.37)) über.

Die Physik der stabilen Grenzschicht ist bisher insgesamt weit weniger verstanden, da einige weitere Phänomene auftreten können (z.B. Kottmeier 1982). Dennoch wird ein ähnliches Vorgehen wie in der konvektiven Grenzschicht angewendet. In der stabilen Grenzschicht werden zur Skalierung die Höhe der stabilen Grenzschicht  $h$ , die Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_*$  und die Monin-Obuchow'sche Stabilitätslänge  $L_*$  verwendet. Die Beschreibung der Spektren basiert auf der lokalen Ähnlichkeitstheorie. Degrazia kam zu folgenden Ausdrücken für die Diffusionskoeffizienten bei stabiler Schichtung:

$$K_{zz}^{Atm.} = u_* h \frac{0,66(1 - \frac{z}{h})^2 X' \frac{z}{h} [0,29 \frac{z}{h} + 0,5X'(1 + 3,7 \frac{h}{L} \frac{z}{h})(1 - \frac{z}{h})]}{[0,29 \frac{z}{h} + X'(1 + 3,7 \frac{h}{L} \frac{z}{h})(1 - \frac{z}{h})]^2}, \quad (2.61)$$

$$K_{xx}^{Atm.} = u_* h \frac{1,15(1 - \frac{z}{h})^2 X' \frac{z}{h} [0,39 \frac{z}{h} + 0,5X'(1 + 3,7 \frac{h}{L} \frac{z}{h})(1 - \frac{z}{h})]}{[0,39 \frac{z}{h} + X'(1 + 3,7 \frac{h}{L} \frac{z}{h})(1 - \frac{z}{h})]^2}. \quad (2.62)$$

Hierbei wurde der Übersichtlichkeit wegen der Index (\*) bei der Monin-Obuchow'schen Stabilitätslänge  $L_*$  weggelassen.  $X'$  ist die dimensionslose Quellentfernung in der stabilen Grenzschicht:

$$X' = \frac{u_* x_q}{\bar{u} h}. \quad (2.63)$$

Die Höhe der stabilen Grenzschicht  $h$  wird diagnostisch über die Vorgabe eines kritischen Temperaturgradienten  $\gamma_{kr}$  bestimmt. Dabei ist die Höhe der stabilen Grenzschicht dann erreicht, wenn von unten nach oben erstmals der kritische Temperaturgradient unterschritten wird. Es gilt:

$$\gamma_{kr} = \left( \frac{\partial \Theta}{\partial z} \right)_{kr} = \frac{0,8 \text{ K}}{100 \text{ m}}. \quad (2.64)$$

### 2.2.3 Die Randbehandlung

An allen Rändern des Modellgebiets müssen Randbedingungen vorgegeben werden. Die Notwendigkeit der Randbedingungen folgt aus dem Typ der Differentialgleichung (2.44).

Der untere Rand stellt eine Senke für Luftbeimengungen dar, da hier trockene Deposition stattfindet, das heißt von Kondensations- und Niederschlagsprozessen unabhängige Deposition. Dabei tritt ein zum Erdboden gerichteter vertikaler turbulenter Fluss  $F_{D,i}$  auf. Im Modell wird dieser über eine Depositionsgeschwindigkeit  $v_{D,i}$  bestimmt:

$$F_{D,i} = \overline{w'c_i'} = -K_{zz} \frac{\partial \overline{c_i}}{\partial z} = \overline{c_i} v_{D,i}. \quad (2.65)$$

Bär und Nester (1992) entwickelten ein Verfahren zur Bestimmung der Depositionsgeschwindigkeit mit einem Widerstandsmodell. Sie ist von meteorologischen, schadstoff- und oberflächenspezifischen Faktoren abhängig. Eine Zusammenstellung findet man bei Schwartz (1992).

Am oberen Rand wird die Divergenz der turbulenten Flüsse in vertikaler Richtung gleich Null gesetzt.

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( -K_{zz} \frac{\partial \overline{c_i}}{\partial z} \right) = 0. \quad (2.66)$$

Infolgedessen bleiben die Konzentrationen am oberen Rand zeitlich konstant. Die Änderung durch Advektion am Einströmrand wird auf Null gesetzt. Startkonzentrationen müssen überall vorgegeben werden, wofür bekannte mittlere Konzentrationen verwendet werden. Am Ausströmrand soll der Gradient des advektiven Schadstoffflusses konstant sein:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\overline{c_i} \overline{u}) = \text{const.} \quad (2.67)$$

Die gasförmigen Emissionen bestehen aus zwei Komponenten. Um realistische luftchemische Bedingungen in der Umgebung der Autobahn zu erhalten, werden im gesamten



Modellgebiet horizontal homogen flächengemittelte Emissionen von Baden-Württemberg (Obermeier et al. 1997) vorgegeben. Den zweiten Quellterm stellt die Autobahn selbst dar. Ihre Emissionen wurden gemäß der Berechnungen von Kühlwein et al. (1998) für den betreffenden Autobahnabschnitt der BAB 656 zwischen Heidelberg und Mannheim berücksichtigt. Mit Hilfe dieser Randbedingungen wird die Diffusionsgleichung (2.44) numerisch integrierbar.

### 2.2.4 Die Gitterstruktur

Die Diffusionsgleichung (2.44) ist im Allgemeinen analytisch nicht lösbar. Zur numerischen Lösung müssen Differentialgleichungen in Differenzengleichungen überführt werden. Diese können dann an diskreten Gitterpunkten gelöst werden. Dabei sind beispielsweise Konzentrationen an einem Gitterpunkt als repräsentativ für das den Gitterpunkt umgebende Volumen anzusehen. Um eine zu große künstliche Diffusion zu vermeiden, muss die Linienquelle von möglichst kleinen Gittervolumina umgeben sein. Mit zunehmender Entfernung von der Quelle werden die Konzentrationsgradienten aufgrund fortschreitender turbulenter Diffusion immer geringer, so dass hier größere Gitterpunktabstände ausreichen. Aus diesen Gründen führt man eine horizontal variable Gitterstruktur ein (Keil 1996). In der Vertikalen ist es generell üblich, mit nach oben zunehmenden Gitterpunktabständen zu rechnen, um den bodennahen Bereich, in dem starke Gradienten der Konzentrationen aber auch der meteorologischen Parameter auftreten, möglichst gut aufzulösen.

Die Vertikalkoordinate  $z$  wird in ein  $\eta$ -System transformiert (Prensil 1980; Dorwarth 1986). Während im  $\eta$ -System der Abstand der vertikalen Rechenflächen konstant ist, nimmt er im  $z$ -System stetig vom Erdboden bis zur Modellobergrenze zu. Folgende Gleichung beschreibt die Koordinatentransformation für die Vertikalkoordinate  $\eta$ :

$$a(1 - \eta)^2 + b(1 - \eta) = \frac{z}{H}. \quad (2.68)$$

$H$  bezeichnet die vorgegebene Höhe der Modellobergrenze,  $a$  und  $b$  sind Parameter, die die Auflösung in der Vertikalen bestimmen. Durch eine weitere vorgegebene Konstante  $\beta$  lassen sich  $a$  und  $b$  berechnen:

$$a = 1 - b, \quad (2.69)$$

$$b = \frac{2}{1 + \beta}. \quad (2.70)$$

Durch die Konstante  $\beta$  lässt sich die Spreizung des Gitters in vertikaler Richtung steuern. Je größer  $\beta$  gewählt wird, desto mehr wächst das Verhältnis von größter zu kleinster Maschenweite an.

Um den straßennahen Bereich gut aufzulösen, wird ebenso für die hier interessierende straßensenkrechte Horizontalkomponente  $x$  eine Koordinatentransformation durchgeführt. Die neue Koordinate heißt  $\alpha$  und genügt folgender Gleichung:

$$\frac{1}{2} (a'(\alpha - 1)^3 + b'(\alpha - 1) + 1) = \frac{x}{X_L}. \quad (2.71)$$

$X_L$  ist die Länge des Modellgebiets in Richtung der Anströmung. Die Faktoren  $a'$  und  $b'$  werden in Analogie zur vertikalen Struktur über ein vorzugebendes  $\beta'$ , das im allgemeinen von  $\beta$  verschieden sein kann, bestimmt:

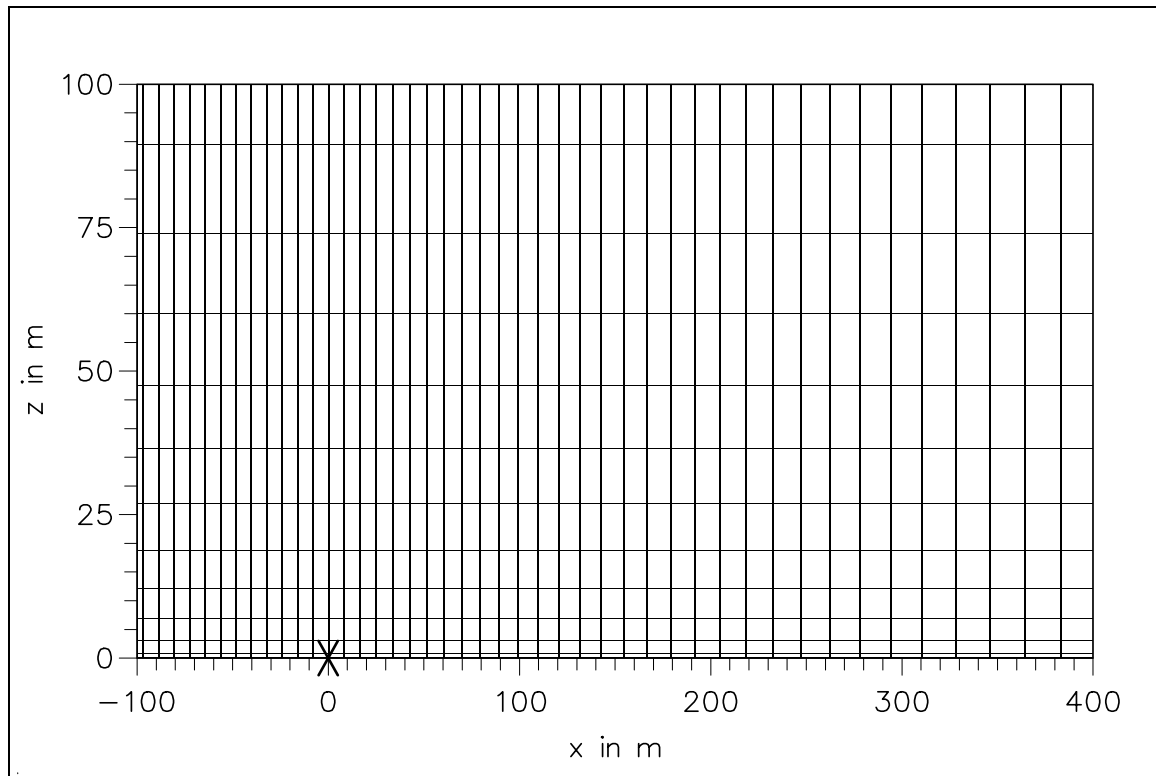
$$a' = 1 - b', \quad (2.72)$$

$$b' = \frac{2}{1 + \beta'}. \quad (2.73)$$

Keil (1996) testete diese Transformation in ihrer Auswirkung auf die Immissionskonzentrationen im Lee einer Punktquelle und konnte signifikante Unterschiede zur äquidistanten Gitterstruktur aufzeigen. In seiner Untersuchung findet man die Herleitung der Diffusionsgleichung im neuen nicht-äquidistanten System und eine Betrachtung über bei der Transformation zu beachtende Stabilitätskriterien bei den angewandten numerischen Verfahren.

Die zeitliche Integration der Diffusionsgleichung wird in Teilschritten nach der Zwischenschrittmethode von Yanenko (1971) ausgeführt. Der Advektionszeitschritt, der Diffusionszeitschritt und der Chemiezeitschritt werden nacheinander abgearbeitet. Der Advektionsterm wird mittels sog. upstream-Differenzen mit nachgeschaltetem antidifusivem Korrekturschritt behandelt, um die numerische Diffusion zu reduzieren (Sweby 1984; Hugelmann 1988). Die turbulente Diffusion wird durch zentrierte Differenzen bestimmt.

Das in dieser Arbeit verwendete zweidimensionale Simulationsgebiet hat eine horizontale Erstreckung von 500 m in x-Richtung bei 45 Gitterpunkten (Abb. 2.2). Die Gitterpunktabstände wachsen dabei von 8 m an der Quelle, die bei  $x=0$  m liegt, bis auf 20 m am Ausströmrand an. Die Höhe des Modellgebiets beträgt 3000 m, um die tageseitliche Entwicklung der konvektiven Grenzschicht vollständig auflösen zu können. In der Abbildung 2.2 sind jedoch lediglich die untersten 100 m dargestellt. Um die



**Abbildung 2.2:** X-Z-Darstellung der untersten 100 m des horizontal und vertikal variablen Modellgitters. Das Kreuz markiert die Lage der Linienquelle.

hohe Auflösung im bodennahen Bereich zu erreichen, werden in vertikaler Richtung 65 Gitterpunkte verwendet. Die Gitterpunktabstände nehmen von 0,8 m am Boden nach oben bis auf 100 m an der Modellobergrenze zu. In den untersten 100 m liegen dabei bereits 12 Rechenflächen, um eine ausreichende Auflösung der hauptsächlich in diesem Bereich auftretenden Abgasfahne zu gewährleisten.

## 2.3 Das Chemiemodell

Mit dem Gasphasenchemiemodell RADM2 (Stockwell et al. 1990; Hass 1991) werden im Ausbreitungsmodell DRAIS die chemischen Produktions- und Verlustterme  $\overline{P}_i$  und  $\overline{L}_i$  aus der Diffusionsgleichung 2.44 bestimmt. Die für chemische Umwandlungen in der Troposphäre relevanten Substanzen und Reaktionen werden dabei berechnet. Es können aus Kapazitätsgründen nicht alle bekannten Substanzen und Reaktionen explizit berücksichtigt werden. In RADM2 werden im Wesentlichen die anorganischen Substanzen explizit und die organischen in einer kondensierten Form behandelt. Die organischen Verbindungen werden abhängig von ihrer Molekülstruktur in eine überschaubare

Anzahl von Modellsubstanzen zusammengefasst. Bei Riemer (1997) findet man eine anschauliche Beschreibung dieser Zusammenfassung. Alle transportierten Substanzen und alle berücksichtigten Reaktionen sind im Anhang aufgeführt. Eine tabellarische Aufstellung der jeweils auf- und abbauenden Reaktionen für jede Substanz gibt Schwartz (1996) an.

Bimolekulare thermische Reaktionen laufen mit temperaturabhängiger Reaktionsgeschwindigkeit ab. Die Geschwindigkeitskoeffizienten  $k_j$  dieser Reaktionen werden mit der Arrhenius-Beziehung bestimmt:

$$k_j = A_j \cdot \exp\left(-\frac{E_j}{R^* T}\right). \quad (2.74)$$

$A_j$  ist hierin ein empirischer Koeffizient der  $j$ -ten Reaktion,  $E_j$  die molekulare Aktivierungsenergie,  $R^*$  die universelle Gaskonstante und  $T$  die Temperatur. Trimolekulare thermische Reaktionen werden mit einem Verfahren nach Troe berechnet (DeMore et al. 1988). Der Einfluss der atmosphärischen Turbulenz auf die Geschwindigkeitskoeffizienten der chemischen Reaktionen wird in RADM2 vernachlässigt. Bisher ist noch nicht sehr viel über diesen Einfluss bekannt und es liegen nur wenige Arbeiten über dieses Problem vor. Von Galmarini et al. (1995) und Fraigneau et al. (1996) durchgeführte Modellrechnungen der Ausbreitung von Stickoxiden unter Berücksichtigung der Reaktion mit Ozon inklusive des in RADM2 vernachlässigten Korrelationsterms lassen einen großen Effekt der Turbulenz erwarten. Meeder und Nieuwstadt (2000) führten Large-Eddy-Simulationen einer Abgasfahne durch und konnten im Falle schneller chemischer Reaktionen zeigen, dass ihr Ablauf von der turbulenten Durchmischung begrenzt sein kann.

Die Berechnung der Geschwindigkeitskoeffizienten für die Photolysereaktionen, der sog. Photolysefrequenzen, wird ausführlich von Hammer (2001) beschrieben. Dabei werden folgende Wechselwirkungen der Strahlung berücksichtigt: Streuung durch Moleküle (Rayleigh-Streuung), Temperaturabhängige Absorption durch Ozon, Absorption durch Stickstoffdioxid und Schwefeldioxid, Extinktion durch Aerosolpartikel, Extinktion durch Wolkentröpfchen und isotrope Reflexion der Strahlung an der Erdoberfläche mit wellenlängenabhängiger Albedo.

Die Gleichungen von RADM2 zur Berechnung chemischer Umwandlungen stellen ein System gekoppelter nicht-linearer Differentialgleichungen dar. Das Verhältnis von größtem zu kleinstem Eigenwert, d.h. hier von größter zu kleinster Reaktionsgeschwindigkeit, ist sehr groß und liegt in der Größenordnung  $10^{10}$ . Für dieses sehr steife System wird ein spezielles, semi-implizites Verfahren verwendet (Chang et al. 1987), das größere

Zeitschritte als andere Verfahren zulässt und einen geringeren Rechenzeit- und Speicherplatzbedarf aufweist. Der Zeitschritt des Chemiemodells wird so gewählt, dass die maximale Konzentrationsänderung einen bestimmten Prozentsatz nicht überschreitet und ist generell kleiner oder gleich dem advektiven Zeitschritt.



# **3 Die Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz**

In diesem Kapitel wird zunächst die Messkampagne BABII beschrieben, bei der sowohl Turbulenzdaten als auch Konzentrationsverteilungen gemessen wurden. Es wird anhand von Messdaten aufgezeigt, inwieweit die Autobahn das Turbulenzfeld infolge fahrzeuginduzierter Turbulenz und durch Überströmen des Damms, auf dem die Autobahn liegt, modifiziert. Für beide Effekte wird im Folgenden ein Parametrisierungsvorschlag gemacht und ein Vergleich von Messung und Parametrisierung gezeigt. Ziel dieser Vorgehensweise ist die Berücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz in den Feldern der abschließend dargestellten Diffusionskoeffizienten, die für die Lösung der Diffusionsgleichung 2.44 benötigt werden, um die Konzentrationsfelder verschiedener Substanzen simulieren zu können.

## **3.1 Die Messkampagne BABII**

Das Feldexperiment BABII wurde vom 27.04.2001 bis 25.05.2001 an der Bundesautobahn 656 zwischen Mannheim und Heidelberg durchgeführt (Fiedler et al. 2001; Kühlwein und Friedrich 2002; Corsmeier et al. 2002; Corsmeier et al. 2003). Übergeordnetes Ziel der BABII-Messkampagne, an der unter Federführung des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung weitere Forschungsinstitute beteiligt waren, war die Bestimmung der Emissionen des Kraftfahrzeugverkehrs. Der Messaufbau wurde so konzipiert, dass aus den Wind- und Konzentrationsprofilen im Luv und im Lee der in etwa senkrecht überströmten Autobahn die Emissionen der Fahrzeuge berechnet werden konnten mit dem Ziel einer Validierung von Emissionsmodellen. Dieses Verfahren der Massenbilanzmethode wurde in einer ersten versuchsweisen Messkampagne an gleicher Stelle bereits erfolgreich getestet (Corsmeier und Vogel 1998; Kühlwein et al. 1998; Bitzer 1999; Vogel et al. 2000). Weitere Ziele der Messkampagne bestanden darin, das für die turbulente Ausbreitung so wichtige Turbulenzfeld im Nahbereich der Autobahn zu erfassen, die von Fahrzeugen oder durch die Überströmung der Autobahn induzierte Turbulenz nachzuweisen und ihre Rolle im Ausbreitungsprozess zu beschreiben mit

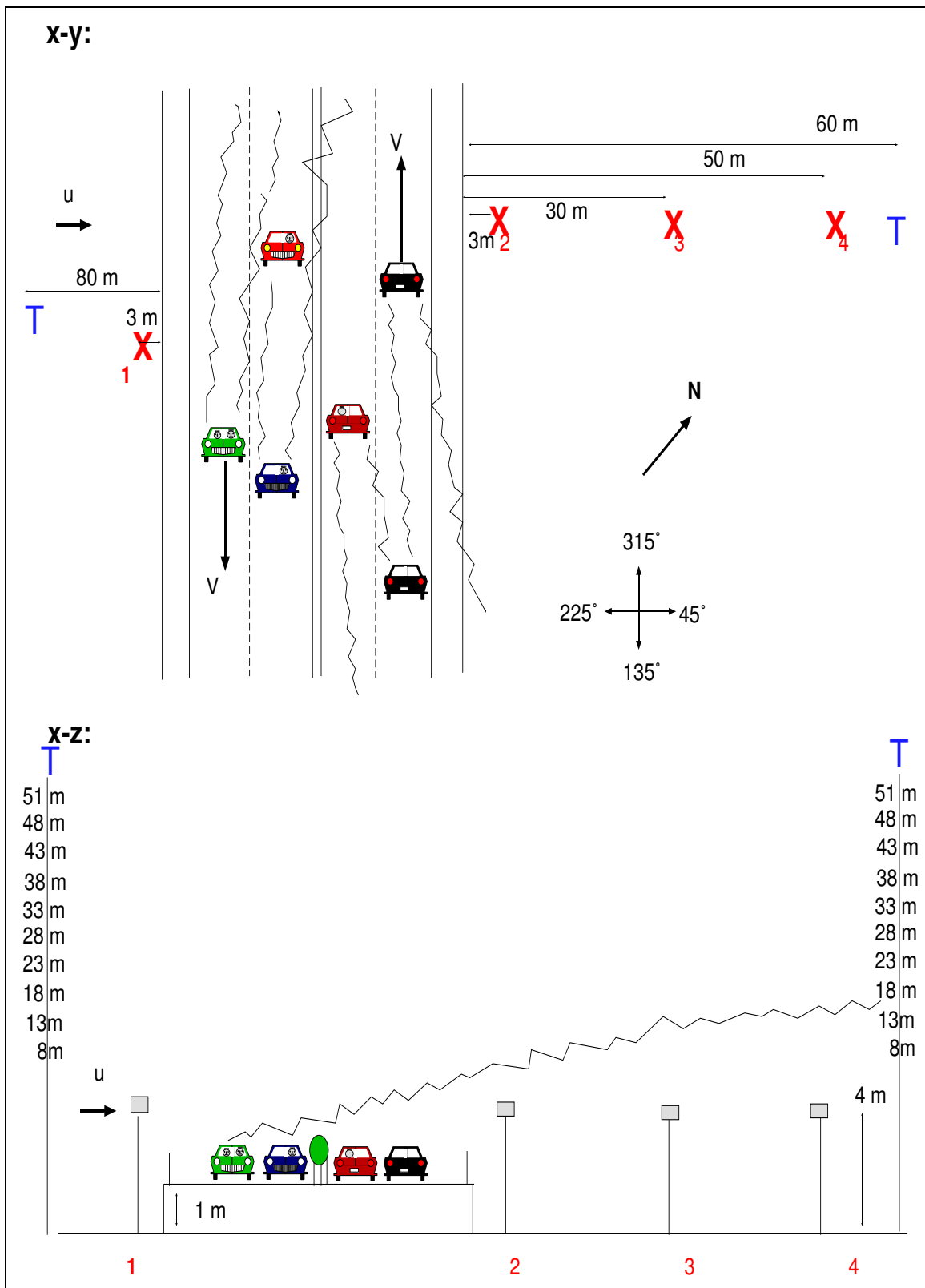
dem Ziel, sie in Form einer geeigneten Parametrisierung in einem Ausbreitungsmodell zu berücksichtigen.

Der Messort an diesem Autobahnabschnitt der Autobahn 656 wurde gewählt, da die Autobahn dort in Richtung  $135^\circ$  -  $315^\circ$  verläuft. Damit liegt sie in etwa senkrecht zur Achse des Rheingrabens und weist daher häufig die für die Massenbilanzmethode ideale senkrechte Anströmungsbedingung auf, da die Strömung im Rheingraben stark kanalisiert ist (Fiedler 1982; Kalthoff und Vogel 1992). Ein weiterer Vorzug des Messortes ist die ebene Form des Geländes, das fast frei von Bebauung und größerem Bewuchs ist. Im wesentlichen handelt es sich bei der Umgebung der Autobahn um Ackerfläche mit zur Zeit der Messkampagne nur niedrigem Vegetationsbestand. Abbildung 3.1 zeigt eine schematische Darstellung des Horizontal- und Vertikalschnittes des Messfeldes. Es sind nur die Messgeräte eingetragen, deren Daten in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden. Die Autobahn verläuft auf einem ca. 1 m hohen Damm und weist vier Fahrspuren, zwei in jeder Richtung, auf. An den seitlichen Rändern und beiderseits des Mittelstreifens ist sie mit ca. 1 m hohen Leitplanken versehen. Insbesondere der Mittelstreifen ist mit bis zu ca. 2 m hohen Büschen bewachsen, was auf einer von einer nahe gelegenen Brücke aufgenommenen Photographie (Abb. 3.2) ersichtlich ist. Die Breite der Autobahn inklusive der Seitenstreifen beträgt 35 m. Das tägliche Verkehrsaufkommen auf diesem Autobahnabschnitt liegt an Wochentagen bei ca. 55 000 Fahrzeugen.

Da im Frühjahr die am häufigsten zu erwartende Windrichtung im Rheintal Südwest ist (Fiedler 1995), wurde auf der südwestlichen Seite ein Turbulenzmast (1) mit einem Abstand von 3 m vom Straßenrand positioniert (Abb. 3.1), während auf der Nordostseite die Turbulenzmasten 2, 3 und 4 in den Entfernungen 3 m, 30 m und 50 m aufgestellt wurden. Die Messhöhe betrug jeweils 4 m. Alle Masten waren mit einem Solent-Ultrasonic-Anemometer und einem schnellen PT100-Thermometer mit einer Messfrequenz von 21 Hz ausgestattet.

Für die Messung der Konzentrationen verschiedener Luftbeimengungen wurden beiderseits der Autobahn 51 m hohe Türme aufgestellt (Abb. 3.1 und Abb. 3.2). Auf der Südwestseite betrug der Abstand zum Straßenrand 80 m, auf der Nordostseite aus logistischen Gründen 60 m. So konnten in verschiedenen Höhen kontinuierlich Konzentrationsmessungen vorgenommen werden. Der große Aufwand, der mit dem Aufstellen der Türme verbunden war, war unumgänglich, weil bei einem versuchsweisen Vorexperiment an gleicher Stelle das damals angewendete Verfahren der Vertikalsondierung mittels Fesselsonden als verbesserungswürdig beurteilt worden war (Corsmeier und





**Abbildung 3.1:** Schematische Darstellung des Horizontalschnittes (oben) und Vertikalschnittes (unten) eines Teils des BABII-Messaufbaus. Die Turbulenzmessgeräte sind mit Kreuzen markiert, die Türme, an denen die Spurenstoffmessungen durchgeführt wurden, mit „T“.



**Abbildung 3.2:** *Photographie des BABII-Messfeldes mit den zwei Messtürmen links und rechts der Autobahn von einer nahe gelegenen Autobahnbrücke mit Blickrichtung Mannheim.*

Vogel 1998; Bäumer 1999; Bitzer 1999; Vogel et al. 2000). Konzentrationen von Stickoxiden und Kohlenmonoxid wurden an beiden Türmen in den Messhöhen 8 m, 13 m, 18 m, 23 m, 28 m, 33 m, 38 m, 43 m, 48 m und 51 m während der gesamten Dauer der BABII-Messkampagne mit einer zeitlichen Auflösung von 10 Minuten vom Institut für Meteorologie und Klimaforschung gemessen. Durch die große Höhe der Türme und die symmetrische Aufstellung konnte sichergestellt werden, dass die Abluftfahne der Autobahn die meiste Zeit voll erfasst werden konnte und etwaige hohe Konzentrationen in der anströmenden Luftmasse detektiert werden konnten. In den Höhen 6 m, 18 m, 28 m, 33 m, 38 m und 48 m wurden des Weiteren die Profile der Windgeschwindigkeit, Temperatur und Feuchte gemessen.

Eine detaillierte Erfassung des Verkehrs wurde während der Messkampagne vom Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung der Universität Stuttgart vorgenommen (Kühlwein und Friedrich 2002). Insbesondere erfolgte dabei eine Klassifizierung der Fahrzeuge in verschiedene Fahrzeugkategorien.

## 3.2 Messergebnisse

In den folgenden zwei Kapiteln werden Ergebnisse der Turbulenzmessungen der BABII-Messkampagne dargestellt. Nach einer spektralen Darstellung der turbulenten kinetischen Energie wird insbesondere der Zusammenhang zwischen Verkehrsparametern und Turbulenz untersucht. Gemessene Vertikalprofile der CO-Konzentration dagegen werden vergleichend mit Ergebnissen von Modellsimulationen im Kapitel 4.1 gezeigt.

### 3.2.1 Turbulente kinetische Energie

Ein wichtiges Maß für die Intensität der Turbulenz in einer Strömung ist die turbulente kinetische Energie  $\bar{e}$ . Sie ist definiert durch:

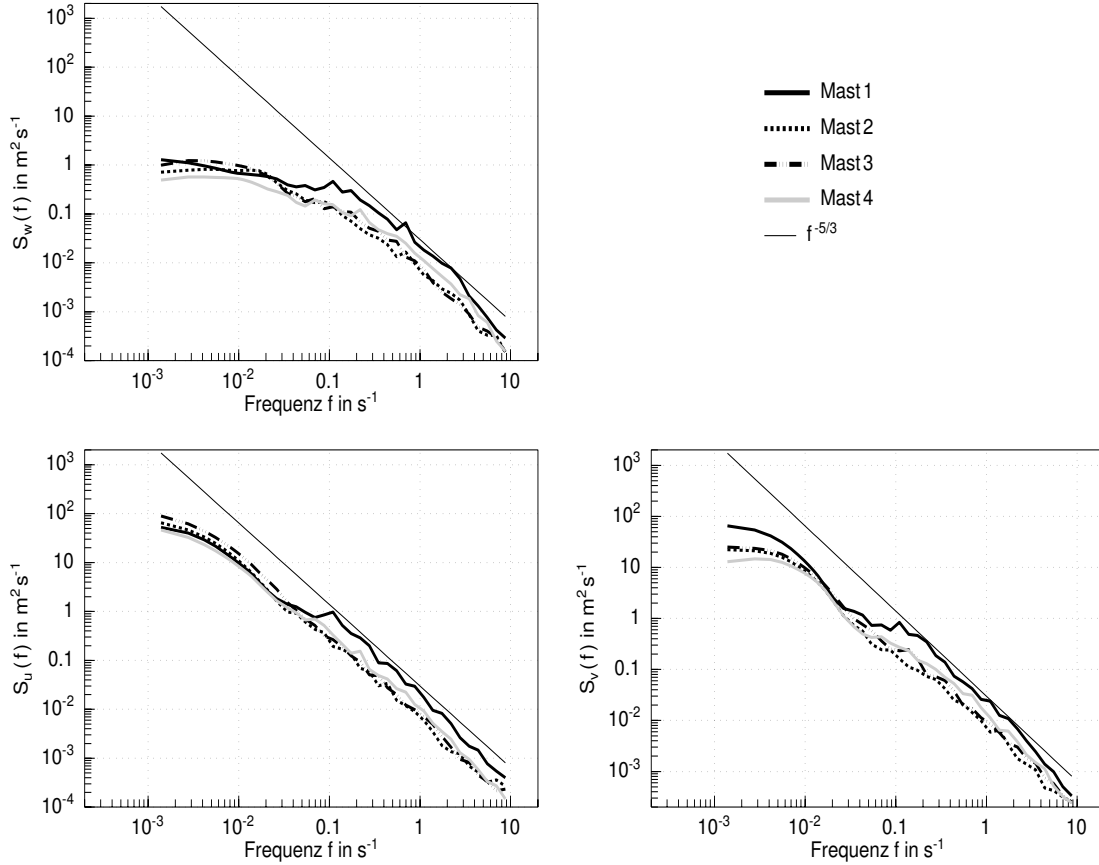
$$\bar{e} = \frac{1}{2} \left( \overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2} \right) = \frac{1}{2} \left( \sigma_u^2 + \sigma_v^2 + \sigma_w^2 \right). \quad (3.1)$$

Es sind dabei  $u$  die longitudinale,  $v$  die laterale und  $w$  die vertikale Windkomponente,  $\overline{u'^2}$ ,  $\overline{v'^2}$  und  $\overline{w'^2}$  die Varianzen und  $\sigma_u$ ,  $\sigma_v$  und  $\sigma_w$  die Standardabweichungen der drei Windkomponenten. Charakteristisch für die turbulente kinetische Energie ist ihre Verteilung auf einen breiten Frequenzbereich, der mehrere Größenordnungen umfasst. Dieses turbulente Energiedichtespektrum  $S_i$  der drei Komponenten lässt sich aus der Fouriertransformation der Autokovarianzfunktion  $C_{ii}(\tau)$  gewinnen. Für die longitudinale Komponente z.B. gilt:

$$S_u(f) = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} C_{uu}(\tau) e^{-i2\pi f\tau} d\tau, \quad (3.2)$$

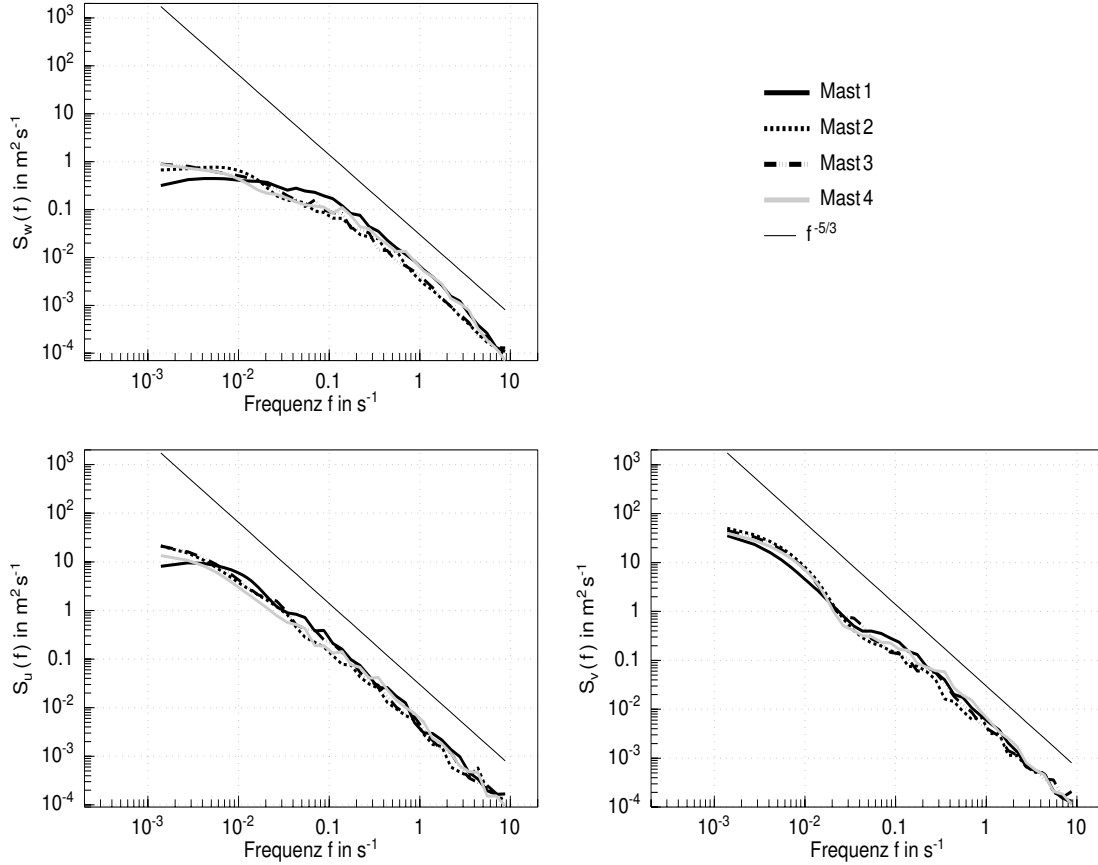
$$C_{uu}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} u'(t) u'(t + \tau) d\tau. \quad (3.3)$$

Abbildung 3.3 zeigt spektrale Energiedichten der drei Windkomponenten aller vier Masten. Links oben sind vergleichend die Spektren der Vertikalkomponenten an den vier Masten, unten links entsprechend die longitudinale und unten rechts die laterale Komponente dargestellt. Das zugrunde liegende Koordinatensystem wurde dabei wie üblich in Richtung des mittleren Windes gedreht. In dem betreffenden Zeitintervall herrschte ein leichter Nordostwind mit einer Windrichtung von  $32^\circ$  und einer Windgeschwindigkeit von  $1,7 \text{ m s}^{-1}$ . Somit lag lediglich Mast 1 im Lee der Autobahn, während sich die Masten 2, 3 und 4 im Luv der Autobahn befanden. Bei allen drei Komponenten ist



**Abbildung 3.3:** Spektren der vertikalen (oben links), longitudinalen (unten links) und lateralen (unten rechts) Windgeschwindigkeitskomponente am 19.05.2001 für das Zeitintervall 16:30 - 17:00 MESZ bei Nordostwind ( $32^\circ$ ;  $1,7 \text{ m s}^{-1}$ ).

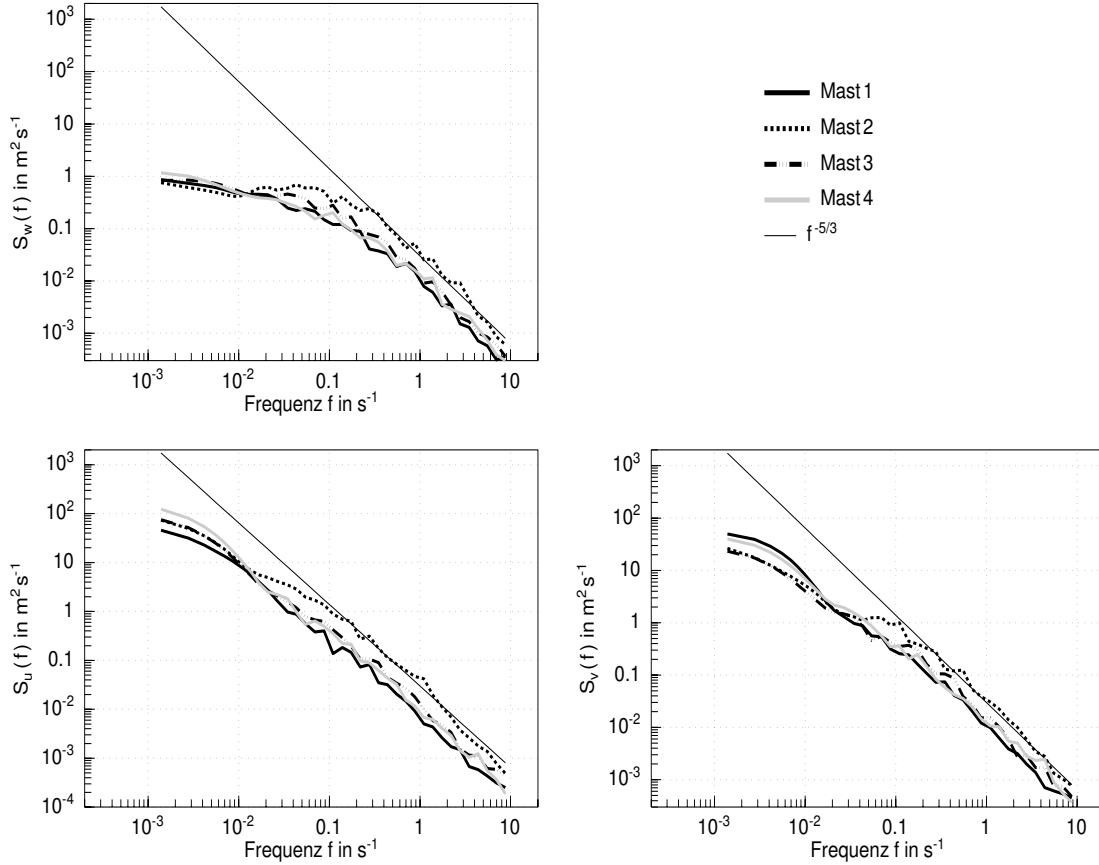
ersichtlich, dass die spektrale Energiedichte ab Frequenzen von ca.  $0,1 \text{ s}^{-1}$  signifikant erhöht ist. Diese Erhöhung setzt sich zum hochfrequenten Ende des Spektrums, also in Richtung des Dissipationsbereichs, fort. Dieses Ergebnis bestätigt die Messungen von Rao et al. (1979) und Chock (1980), die ebenfalls am Straßenrand durchgeführt wurden, sowie die Messungen von Rao et al. (2002), die auf einem mitgeführten Anhänger gemacht wurden. Alle Spektren erfüllen im Inertialbereich das  $-\frac{5}{3}$ -Gesetz für isotrope Turbulenz. Da die Darstellung doppelt-logarithmisch erfolgt ist, beträgt der Zuwachs im genannten Frequenzbereich leeseitig eine halbe Zehnerpotenz und stellt somit eine sehr deutliche Erhöhung des luvseitigen Niveaus dar. Bei Geschwindigkeiten der Größenordnung  $1 \text{ m s}^{-1}$  korrespondiert eine Frequenz von ca.  $0,1 \text{ s}^{-1}$  mit Wirbelgrößen von etwa 10 m. Dies ist die Obergrenze der Größe von auf der Autobahn zu erwartenden fahrzeuginduzierten Leewirbeln (Eskridge und Rao 1986). Bei der herr-



**Abbildung 3.4:** *Spektren der vertikalen (oben links), longitudinalen (unten links) und lateralen (unten rechts) Windgeschwindigkeitskomponente am 19.05.2001 für das Zeitintervall 18:00 - 18:30 MESZ bei Nordostwind ( $19^\circ$ ;  $1,2 \text{ m s}^{-1}$ ) während einer Vollsperrung der Autobahn.*

schen geringen Windgeschwindigkeit sollte der beobachtete Energiezuwachs somit zu einem Großteil vom Verkehr verursacht worden sein. Die leicht erhöhten Werte von Mast 4 sind auf den nur 10 m entfernten Betonsockel des Kranes zurückzuführen, der bei nordöstlichen Anströmungen im Luv des Mastes 4 stand und daher geringe Um- und Überströmungseffekte bewirkt haben kann.

Zum Vergleich werden in Abbildung 3.4 die spektralen Energiedichten zu einem späteren Zeitpunkt am gleichen Tag während einer Vollsperrung der Autobahn bei wiederum leichtem Nordostwind ( $19^\circ$ ;  $1,2 \text{ m s}^{-1}$ ) dargestellt. Diese Vollsperrung wurde wegen der Sprengung einer Autobahnbrücke in der Nähe des Messfeldes durchgeführt. In diesem Fall ist der Anstieg der turbulenten kinetischen Energie am Mast 1 wesentlich geringer als in der zuvor diskutierten Abbildung 3.3, da nun die fahrzeuginduzierte Turbulenz

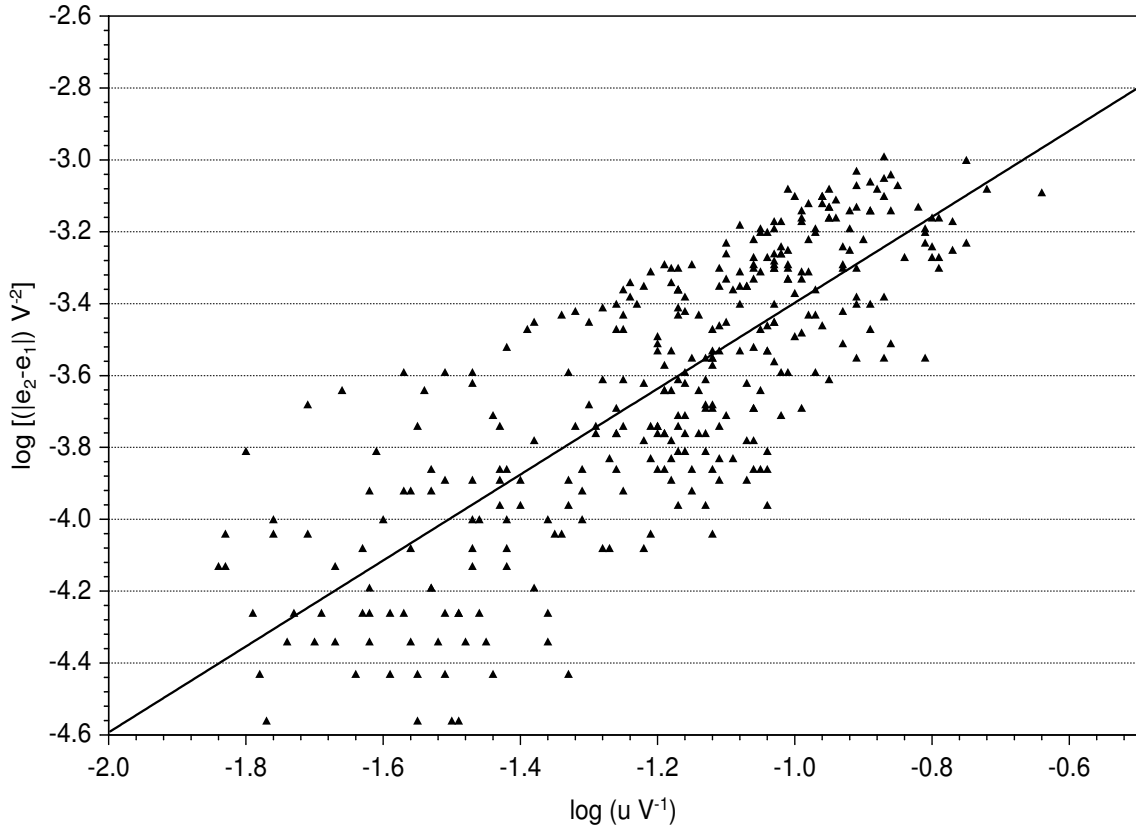


**Abbildung 3.5:** Spektren der vertikalen (oben links), longitudinalen (unten links) und lateralen (unten rechts) Windgeschwindigkeitskomponente am 27.04.2001 für das Zeitintervall 18:00 - 18:30 MESZ bei Westwind ( $270^\circ$ ;  $1,8 \text{ m s}^{-1}$ ).

fehlt.

Bei umgekehrten Strömungsbedingungen mit westlicher Anströmung ( $270^\circ$ ;  $1,8 \text{ m s}^{-1}$ ) und typischen Verkehrsverhältnissen erkennt man einen signifikanten Anstieg der turbulenten kinetischen Energie in allen 3 Komponenten beim Mast 2 (Abb. 3.5). Am Mast 3 in einer Entfernung vom Straßenrand von 30 m ist die turbulente kinetische Energie in allen drei Komponenten bereits wieder deutlich zurückgegangen. Mast 4 in 50 m Entfernung zeigt nur noch leicht erhöhte Werte gegenüber Mast 1. Die Reichweite der Auswirkungen der Autobahn auf die turbulente kinetische Energie kann daher als geringfügig größer als 50 m vom Straßenrand abgeschätzt werden. Bei einer Breite der Autobahn von 35 m inklusive Seitenstreifen ist die maximale Reichweite von der Autobahnmitte gerechnet als kleiner 100 m anzusehen.

Für die turbulente Diffusion der auf der Autobahn emittierten Schadgase ist im Nahbe-



**Abbildung 3.6:** Mit der Fahrzeuggeschwindigkeit  $V$  normierte Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Mast 1 und Mast 2 als Funktion der normierten straßensenkrechten Windkomponente  $u$ .

reich der hochfrequente Anteil der turbulenten kinetischen Energie relevant. Wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, führen niederfrequente und somit größerskalige Schwankungen nicht zu einem Diffusionsprozess, sondern lediglich zu einem Mäandern der Schadstoff-fahne. Aufgrund der charakteristischen Gestalt der Spektren (Abb. 3.3, 3.4 und 3.5) können aber die geringen Differenzen zwischen den Messungen an den vier Masten im langwelligen Bereich die turbulente kinetische Energie dominieren. Solche langwelligen Schwankungen können beispielsweise eine Folge von instationären Wirbelablösungen bei der Dammüberströmung sein, wie Heldt (1991) anhand der Strömung über einen Hochwasserschutzdamm zeigen konnte. Der Bereich der fahrzeuginduzierten Turbulenz liegt wie oben beschrieben ebenfalls im hochfrequenten Teil des Spektrums. Aus diesen Gründen werden für die turbulente kinetische Energie im Folgenden aus den Spektren durch Integration über den Frequenzbereich von  $0,1 \text{ s}^{-1}$  bis  $10 \text{ s}^{-1}$  gewonnene Werte verwendet:

$$\bar{e} = \frac{1}{2} \int_{0,1 \text{ s}^{-1}}^{10 \text{ s}^{-1}} (S_u + S_v + S_w) df. \quad (3.4)$$

Die Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Mast 1 und Mast 2 ist von der straßensenkrechten Windkomponente abhängig (Abb. 3.6). Die Normierung erfolgte nach einem Vorschlag von Eskridge und Thompson (1982) mittels der mittleren Fahrzeuggeschwindigkeit  $V = 120 \text{ km h}^{-1}$ , die von Kühlwein und Friedrich (2002) gemessen wurde. Es wurde der Betrag der Differenz der turbulenten kinetischen Energie gebildet, da beide Anströmungsrichtungen aus den Sektoren Südwest und Nordost verwendet wurden. Für den Sektor Südwest wurden Windrichtungen zwischen  $180^\circ$  und  $270^\circ$  zugelassen, für den Sektor Nordost  $0^\circ$  bis  $90^\circ$ . Die Auftragung erfolgte doppelt logarithmisch. Jeder der 340 Messpunkte repräsentiert dabei ein Intervall von 30 Minuten. Die Regressionsgerade hat einen Anstieg von 1,2 bei einer Korrelation von 0,795, somit gilt für die Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Mast 1 und Mast 2:

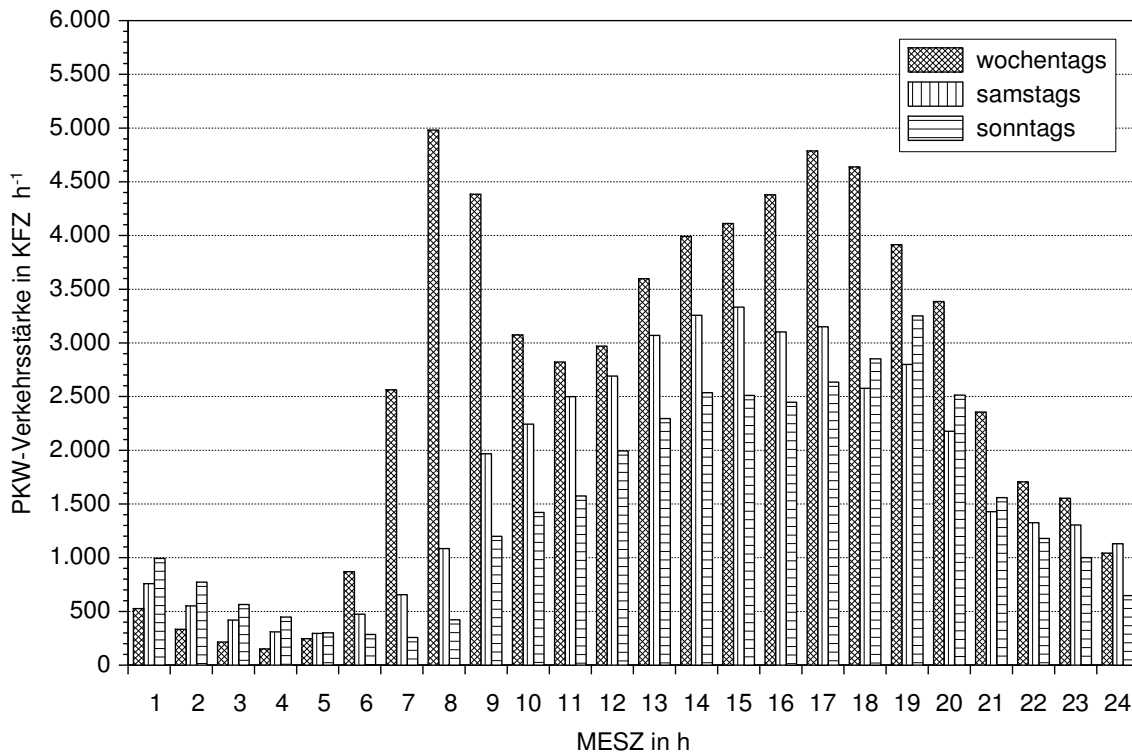
$$|\bar{e}_2 - \bar{e}_1| \propto \bar{u}^{1.2}. \quad (3.5)$$

Dieser Anstieg der Regressionsgeraden bestätigt Messungen im Windkanal von Eskridge und Thompson (1982) für den fahrzeuginduzierten Anteil der Turbulenz. Da mit zunehmender straßensenkrechter Windgeschwindigkeit die Transportzeit der Wirbel vom Entstehungsort auf der Fahrbahn zum Ort des Messgerätes sinkt, ist der Leewirbel eines Fahrzeugs zum Messzeitpunkt weniger gealtert und enthält daher noch mehr turbulente kinetische Energie, da die Wirkungszeit von Dissipation und Diffusion entsprechend geringer ist. Ebenso ist zu erwarten, dass Turbulenzelemente, die infolge der Überströmung der Autobahn entstehen, sowohl in ihrer Entstehung als auch in ihrer Verlagerung eine Geschwindigkeitsabhängigkeit aufweisen. Um die Differenz turbulenter kinetischer Energie zu verschiedenen Zeitpunkten zwischen Mast 1 und Mast 2, die naturgemäß bei unterschiedlichen straßensenkrechten Windgeschwindigkeiten gemessen wurde, vergleichbar zu machen, muss sie entsprechend mit  $(\bar{u}/V)^{1.2}$  normiert werden.

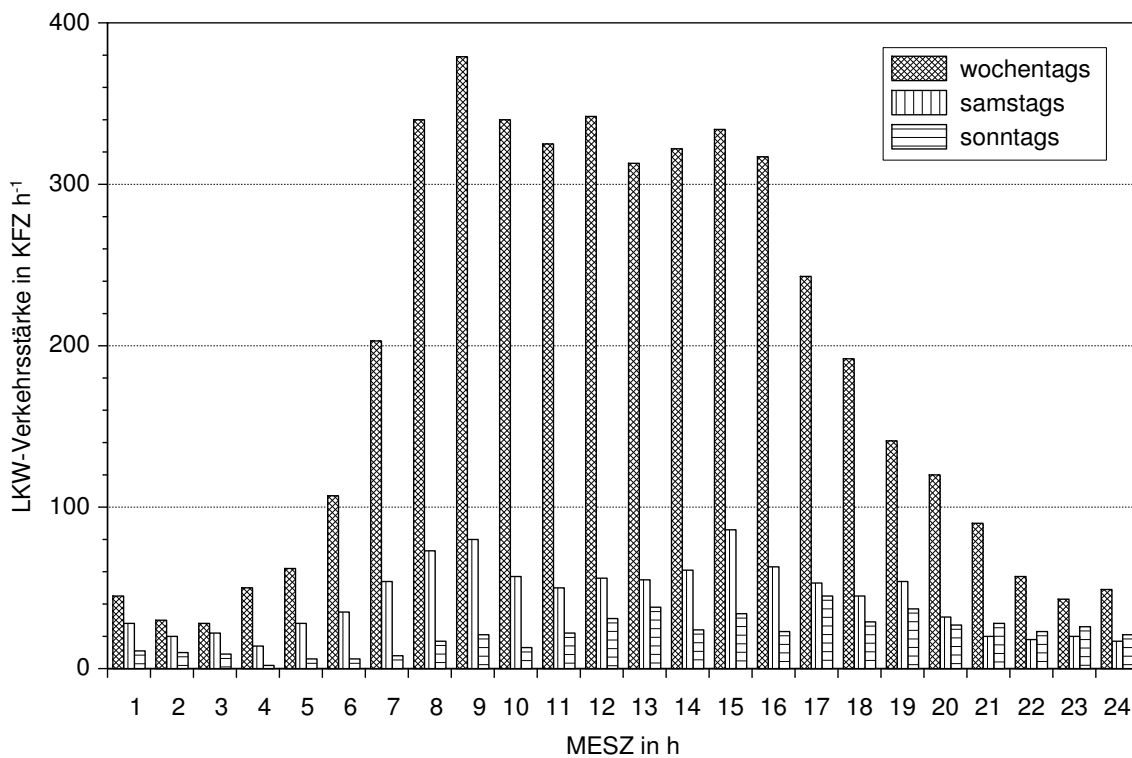
### 3.2.2 Verkehr und Turbulenz

In diesem Abschnitt soll der Zusammenhang zwischen der Turbulenz und der Verkehrsstärke auf der Autobahn untersucht werden. Die verwendeten Verkehrsdaten wurden von Kühlwein und Friedrich (2002) ermittelt. Diese Daten lagen in einer zeitlichen Auflösung von einer Stunde vor. Abhängig von der Fahrzeuggröße wurden in der vorliegenden Untersuchung zwei verschiedene Fahrzeugkategorien, PKW und LKW, verwendet, da aus der Literatur ein signifikanter Unterschied bzgl. der von ihnen bewirk-





**Abbildung 3.7:** Mittlerer Tagesgang der Pkw-Verkehrsstärke wochentags, samstags und sonntags während der BABII-Messkampagne nach Verkehrszählungen von Kühlwein und Friedrich (2002).



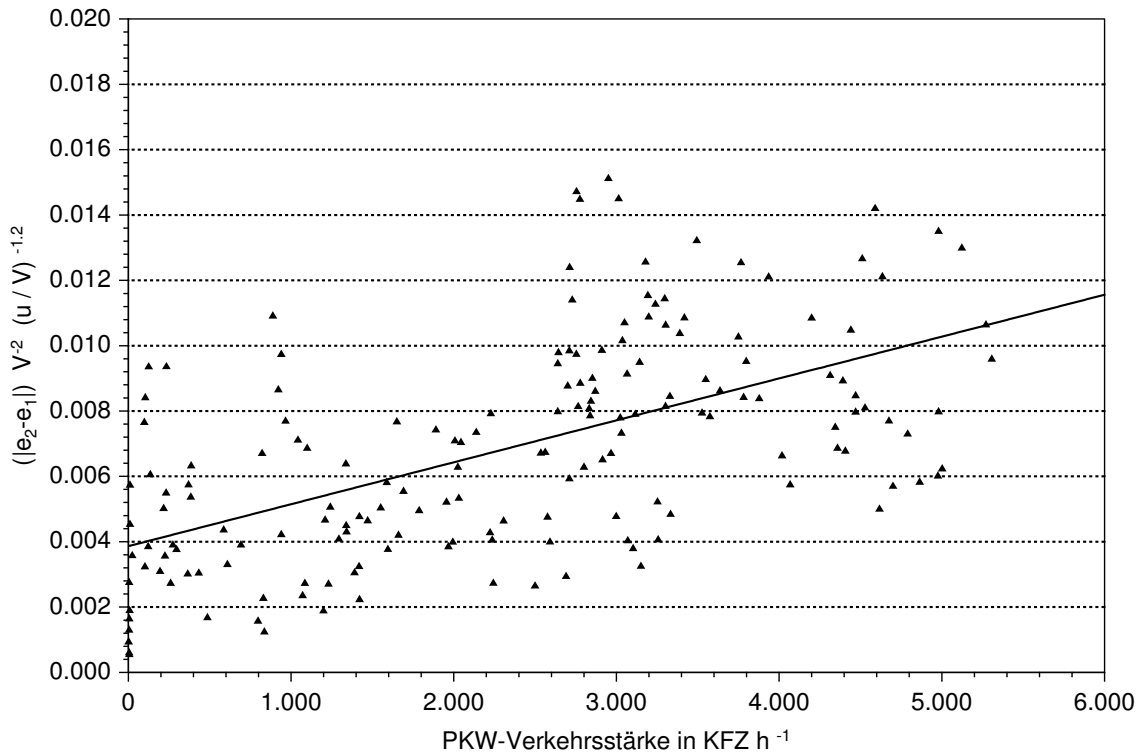
**Abbildung 3.8:** Wie Abbildung 3.7, aber für die Lkw-Verkehrsstärke.

ten fahrzeuginduzierten Turbulenz bekannt ist (Eskridge und Hunt 1979; Eskridge und Thompson 1982; Henne 2001).

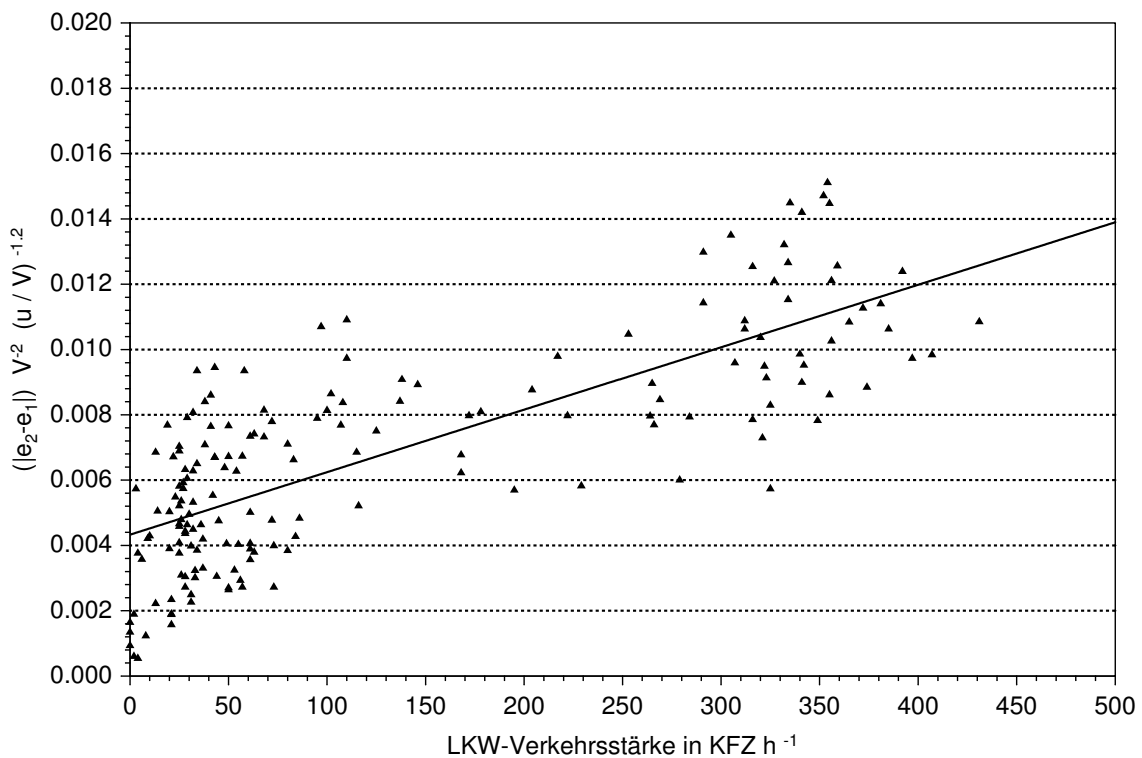
Abbildung 3.7 zeigt die während der BABII-Messkampagne gemessenen mittleren Tagesgänge der Pkw-Verkehrsstärken an Wochentagen, Samstagen und Sonntagen. Diese Unterscheidung ist aufgrund der völlig unterschiedlichen Charakteristik der drei Tagesgänge unerlässlich. An Wochentagen weist der Pkw-Verkehr zwei signifikante Maxima von ca. 5000 Fahrzeugen pro Stunde um 8 Uhr, d.h. im Zeitraum zwischen 7 und 8 Uhr, und um 17 Uhr, d.h. im Zeitraum von 16 bis 17 Uhr, auf. Das erste Maximum ist dabei schmaler als das zweite. Dieser Tagesgang kann als charakteristisch für einen vom Pendelverkehr dominierten Autobahnabschnitt angesehen werden. Die Bundesautobahn 656 verbindet lediglich Mannheim und Heidelberg und wird im Gegensatz zu Fernverbindungen im Wesentlichen von Pendlern und überwiegend lokalem Lieferverkehr befahren. In den Abendstunden wird der Verkehr schnell schwächer und in der zweiten Nachthälfte werden unter 500 Fahrzeuge pro Stunde registriert. In den Nächten zu Samstag und Sonntag dagegen ist die Autobahn deutlich stärker befahren. Tagsüber erreicht die Verkehrsdichte allerdings ab dem Vormittag nur ca. zwei Drittel der Werte des Wochentags, wobei das morgendliche Maximum völlig fehlt. Sonntags tritt mit Ausnahme des frühen Abends noch weniger Verkehr auf.

Die mittleren Tagesgänge der Lkw-Verkehrsstärken an Wochentagen, Samstagen und Sonntagen sind in Abbildung 3.8 dargestellt. Der Anteil des Lkw-Verkehrs am gesamten Verkehr liegt auf diesem Autobahnabschnitt bei deutlich unter 10 Prozent und ist somit im Vergleich zu Autobahnen des Fernverkehrs als gering einzustufen. Im Gegensatz zum Pkw-Verkehr weist der Lkw-Verkehr wochentags einen Tagesgang mit einem breiten Maximum auf. Im Zeitraum zwischen 7 und 16 Uhr passieren stündlich zwischen 300 und 400 LKW das Messfeld. Nachts geht der Lkw-Anteil auf 30 bis 60 Fahrzeuge pro Stunde zurück. Samstags ist der Lkw-Verkehr deutlich geringer und bleibt ganztags unter 100 Fahrzeugen pro Stunde, sonntags unter 50 Fahrzeugen pro Stunde.

In Abbildung 3.9 ist die normierte Differenz der turbulenten kinetischen Energie als Funktion der Pkw-Verkehrsstärke dargestellt. Die Normierung erfolgte dabei zusätzlich mit  $(\bar{u}/V)^{1,2}$  aufgrund der Erkenntnisse des vorhergehenden Kapitels. Jeder der 170 Messpunkte entspricht einem Intervall von einer Stunde, da die Verkehrsdaten in einer zeitlichen Auflösung von einer Stunde vorlagen. Die Messdaten mit einer Verkehrsdichte von Null wurden während der Vollsperrung der Autobahn 656 gewonnen. Die ebenfalls eingezeichnete Regressionsgerade weist einen Anstieg von  $1,283 \cdot 10^{-6} \text{ h Kfz}^{-1}$  und einen Achsenabschnitt von 0,0039 bei einer Korrelation von 0,583 auf. Auch ohne Verkehr ist

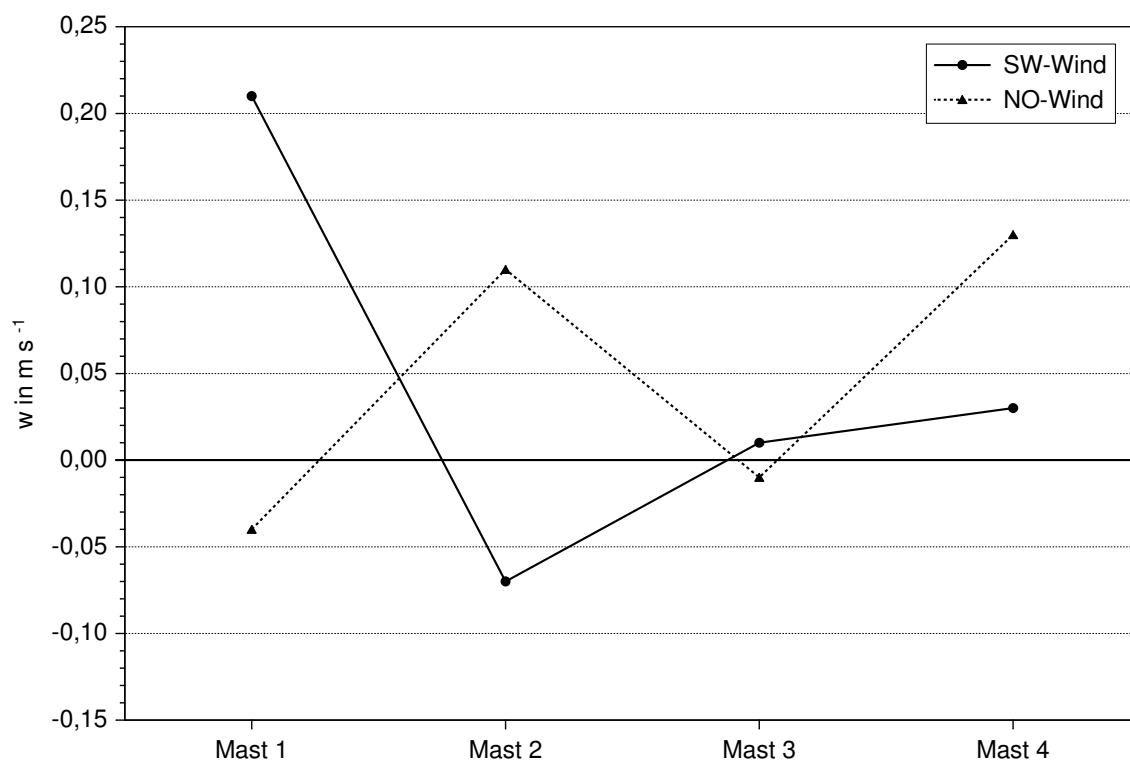


**Abbildung 3.9:** Normierte Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Mast 1 und Mast 2 als Funktion der Pkw-Verkehrsstärke.



**Abbildung 3.10:** Wie Abbildung 3.9, aber als Funktion der Lkw-Verkehrsstärke.

die turbulente kinetische Energie am leeseitigen Mast somit deutlich erhöht. Dies ist auf die Überströmung der Autobahn zurückzuführen, da sie durch ihre Lage auf einem ca. 1 m hohen Damm und ihre durchgehenden Leitplanken und einige Büsche auf dem Mittelstreifen als Strömungshindernis wirkt. Bei schwachem Pkw-Verkehr ist somit der Überströmungseffekt bedeutender als die fahrzeuginduzierte Turbulenz. Thermisch induzierte Turbulenzproduktion infolge der unterschiedlichen Oberflächenbeschaffenheit der betonierten Autobahn gegenüber dem vegetationsbestandenen Umland oder infolge der Übertemperatur der emittierten Schadgase ist nach Erkenntnissen von Weiß (2002) und Kalthoff et al. (2003) von untergeordneter Bedeutung. Auch Rao et al. (1979) schätzten die thermischen Effekte als weitgehend vernachlässigbar gegenüber den mechanischen ein. Sie können aber neben lokalen Einflussfaktoren wie topographischen Unebenheiten und Asymmetrie des Messfeldes einen Teil der Streuung bewirkt haben.



**Abbildung 3.11:** Mittlere Vertikalwinde bei Südwestwind und bei Nordostwind. Die Autobahn liegt zwischen Mast 1 und Mast 2.

Die gleiche Auftragung wie in Abbildung 3.9 nun aber für die Lkw-Verkehrsstärke zeigt Abbildung 3.10. Die eingezeichnete Regressionsgerade weist einen Anstieg von  $1,914 \cdot 10^{-5} \text{ h Kfz}^{-1}$  und einen Achsenabschnitt von 0,0043 auf. Die Korrelation ist mit 0,773 signifikant größer als im vorher untersuchten Fall der Abhängigkeit vom

Pkw-Verkehr. Dies deutet auf die deutlich höhere Turbulenzproduktion durch Lastkraftwagen und andere große Fahrzeuge im Vergleich zu Personenkraftwagen hin. Zu dieser Ansicht gelangten ebenfalls Henne (2001), der Messungen in Straßenschluchten durchführte, und Moosmüller et al. (1998). In der Darstellung wird wiederum ein starker Überströmungseffekt durch erhöhte Werte im Lee in Abwesenheit des Verkehrs deutlich. Dieser Effekt wird ebenso im Vertikalwindfeld sichtbar. Abbildung 3.11 zeigt über den gesamten vierwöchigen Messzeitraum gemittelte Vertikalwinde an den vier Masten für Südwest- bzw. Nordostanströmung. Bei Südwestwind tritt am luvseitigen Mast 1 ein signifikanter Aufwind auf, gefolgt von einem etwas schwächeren Abwind im nahen Lee an Mast 2. An Mast 3 und Mast 4 treten nur geringe mittlere Vertikalwinde auf. Bei Nordostwind kehren sich die Verhältnisse weitgehend um. Nun liegt Mast 1 im Lee und weist einen Abwind auf, dem ein Aufwind an Mast 2 gegenüber steht. Am Mast 3 ist die Vertikalgeschwindigkeit im Mittel nahezu Null. Der große Wert an Mast 4 ist eine Folge des naheliegenden Betonssockels des Turmes und steht nicht mit der Überströmung der Autobahn in Zusammenhang.

### 3.3 Die Parametrisierung der fahrzeuginduzierten Turbulenz und der Überströmung

Im folgenden Kapitel wird die Parametrisierung dargestellt, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Wie in den vorhergehenden zwei Kapiteln dargelegt wurde, hat die Autobahn signifikante Auswirkungen auf die turbulente kinetische Energie. Neben der fahrzeuginduzierten Turbulenz konnte ebenfalls ein vom Verkehr unabhängiger Effekt infolge der Überströmung der auf einem ca. 1 m hohen Damm verlaufenden Autobahn nachgewiesen werden. Da die turbulente kinetische Energie ein gutes Maß für die turbulente Diffusion in der Atmosphäre darstellt (z.B. Eskridge et al. 1979), wirkt sich eine Modifizierung des Turbulenzfeldes unmittelbar auf die Ausbreitung von Automobilabgasen aus. Beide Effekte müssen daher in einer geeigneten Form parametrisiert werden. Im Folgenden wird ein Vorschlag unterbreitet, der auf einer prognostischen Gleichung für die turbulente kinetische Energie beruht. Dabei wird nur der an der Autobahn von den zwei genannten Effekten verursachte zusätzliche Anteil der turbulenten kinetischen Energie beschrieben. Dieser Anteil ist stromauf der Autobahn naturgemäß Null. Analog zur Diffusionsgleichung 2.44 lässt sich eine zweidimensionale Gleichung für die zeitliche Änderung der zusätzlichen, durch die Autobahn bewirkten turbulenten kinetischen Energie unter Berücksichtigung des Gradientansatzes für die turbulenten

Flüsse aufstellen:

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{e}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} K_{xx} \frac{\partial \bar{e}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} K_{zz} \frac{\partial \bar{e}}{\partial z} + P_V + P_{\bar{U}} - \epsilon. \quad (3.6)$$

Die lokal-zeitliche Änderung der zusätzlichen turbulenten kinetischen Energie wird somit durch Advektion, turbulente Diffusion in horizontaler und vertikaler Richtung, durch Produktion fahrzeuginduzierter Turbulenz durch den Verkehr  $P_V$ , durch Produktion infolge der Überströmung des Autobahndammes inklusive der durchgehenden Leitplanken  $P_{\bar{U}}$  und durch Dissipation bewirkt. Dabei werden die Diffusionskoeffizienten gemäß Gleichungen 2.45 und 2.46 als Summe von atmosphärischen und autobahninduzierten Anteilen berechnet. Die autobahninduzierten Anteile hängen wiederum von der turbulenten kinetischen Energie ab, wie in diesem Kapitel später dargelegt wird. Diese partielle Differentialrechnung in Raum und Zeit kann bei Vorgabe entsprechender Randbedingungen wie Gl. 2.44 numerisch gelöst werden. Am Unterrand des Modellgebiets ist die turbulente kinetische Energie als Randbedingung vorzugeben. Es gilt:

$$\bar{e}(z = z_0) = 0. \quad (3.7)$$

Für eine geeignete Formulierung des Produktionsterms für die fahrzeuginduzierte Turbulenz  $P_V$  wird von der bekannten Formulierung der Widerstandskraft  $F_W$  eines Hindernisses mit der Stirnfläche  $A$  bei einer Strömungsgeschwindigkeit  $V$ , die hier der Fahrzeuggeschwindigkeit entspricht, ausgegangen (z.B. Heldt 1991):

$$F_W = \frac{1}{2} \rho c_w A V^2. \quad (3.8)$$

In dieser Formulierung bezeichnet  $\rho$  die Luftdichte und  $c_w$  den Widerstandsbeiwert eines Fahrzeugs. Somit bezeichnet  $F_W$  die Kraft, die ein Fahrzeug mit der Geschwindigkeit  $V$ , der Stirnfläche  $A$  und dem Widerstandsbeiwert  $c_w$  auf die Atmosphäre mit der Dichte  $\rho$  ausübt und umgekehrt. Die dafür aufzubringende Leistung  $P$  eines Fahrzeugs, die der Fahrzeugmotor zur Verfügung stellen muss, berechnet sich zu

$$P = F_W \cdot V = \frac{1}{2} \rho c_w A V^3. \quad (3.9)$$

Entsprechend ist die Leistung von  $N$  Fahrzeugen an der Atmosphäre

$$N \cdot P = N \cdot \frac{1}{2} \rho c_w A V^3. \quad (3.10)$$

Bezogen auf ein Teilstück der Autobahn der Länge  $L$  erbringen  $N$  Fahrzeuge somit die Leistung pro Längeneinheit

$$\frac{N}{L} \cdot P = \frac{N}{L} \cdot \frac{1}{2} \rho c_w A V^3. \quad (3.11)$$

Die Verkehrsstärke  $\rho_V$  gibt die Anzahl der Fahrzeuge  $N$  an, die einen festen Punkt der Autobahn in einem Zeitintervall  $\Delta t$  passieren:

$$\rho_V = \frac{N}{\Delta t}. \quad (3.12)$$

Bei gegebener räumlicher Verteilung  $\frac{N}{L}$  ist die Verkehrsstärke zu der Geschwindigkeit der Fahrzeuge  $V$  proportional:

$$\rho_V = V \frac{N}{L}. \quad (3.13)$$

Aus Gleichung 3.13 folgt somit für  $\frac{N}{L}$ :

$$\frac{N}{L} = \frac{\rho_V}{V}. \quad (3.14)$$

Setzt man dies auf der rechten Seite der Gleichung 3.11 ein und dividiert diese durch die Luftdichte  $\rho$ , so erhält man:

$$\frac{N}{L} \frac{P}{\rho} = \frac{1}{2} c_w A V^2 \rho_V. \quad (3.15)$$

Mit der Stirnfläche  $A$  der Fahrzeuge als Produkt aus Fahrzeugbreite  $B_{Kfz}$  und Fahrzeughöhe  $H_{Kfz}$

$$A = B_{Kfz} \cdot H_{Kfz} \quad (3.16)$$

ergibt sich:

$$\frac{N}{L} \frac{P}{\rho} = \frac{1}{2} c_w B_{Kfz} H_{Kfz} V^2 \rho_V. \quad (3.17)$$

Gleichung 3.17 besitzt die Einheit  $\text{m}^4 \text{s}^{-3}$ . Um den gesuchten Produktionsterm für die fahrzeuginduzierte Turbulenz  $P_V$  zu erhalten, muss im weiteren noch das Gitterpunktvolumen an der Quelle berücksichtigt werden. Die y-Richtung, d.h. die zur Autobahn parallele Richtung, ist durch die Formulierung des Produktionsterms pro Längeneinheit  $L$  bereits bedacht. Mit der Breite in x-Richtung  $\Delta x_Q$  und der Höhe des Gitterpunktvolumens an der Quelle  $\Delta z_Q$  lässt sich  $P_V$  wie folgt formulieren:

$$P_V = \frac{1}{2} c_w B_{Kfz} H_{Kfz} V^2 \rho_V \frac{1}{\Delta x_Q \Delta z_Q}. \quad (3.18)$$

Damit besitzt  $P_V$  gemäß Gleichung 3.18 die Einheit  $\text{m}^2 \text{s}^{-3}$  wie Gleichung 3.6. Der Produktionsterm für die fahrzeuginduzierte Turbulenz hängt somit neben Fahrzeugparametern wie Widerstandsbeiwert, Breite, Höhe und Geschwindigkeit auch von der zeitlich variierenden Verkehrsstärke ab.

Der zweite Produktionsterm in Gleichung 3.6 für die durch die Überströmung der Autobahn produzierte Turbulenz  $P_{\tilde{U}}$  basiert ebenfalls auf den Formulierungen für Kraft und Leistung an einem Hindernis in einer Strömung (Gl. 3.8 und 3.9). Dividiert man Gleichung 3.9 wiederum durch die Längeneinheit  $L$  und die Luftdichte  $\rho$  und berücksichtigt, dass  $u$  die autobahnsenkrechte Windkomponente ist, so erhält man:

$$\frac{P}{\rho L} = \frac{1}{2} \frac{A_D}{L} c_{w,D} u^3. \quad (3.19)$$

Darin bedeuten  $A_D$  die Stirnfläche des Dammes, auf dem die Autobahn verläuft, und  $c_{w,D}$  der Widerstandsbeiwert des Dammes. Da die Stirnfläche das Produkt aus Längeneinheit  $L$  und Höhe des Dammes  $H_D$  ist,

$$A_D = L \cdot H_D, \quad (3.20)$$

lässt sich Gleichung 3.19 schreiben als:

$$\frac{P}{\rho L} = \frac{1}{2} H_D c_{w,D} u^3. \quad (3.21)$$

Unter Berücksichtigung des Gitterpunktvolumens analog zur obigen Argumentation lässt sich  $P_{\tilde{U}}$  wie folgt formulieren:

$$P_{\tilde{U}} = \frac{1}{2} H_D c_{w,D} u^3 \frac{1}{\Delta x_Q \Delta z_Q}. \quad (3.22)$$

Neben der Dammhöhe und seiner Form, die den Widerstandsbeiwert bestimmt, ist es somit vor allem die Geschwindigkeit, die die Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung  $P_{\tilde{U}}$  bestimmt.

Im Folgenden muss nun noch eine Formulierung für die Dissipation  $\epsilon$  in Gleichung 3.6 angegeben werden. Es wurde ein Ansatz von Stull (1988) ausgewählt, bei dem die Dissipation von der turbulenten kinetischen Energie selbst und einer charakteristischen Länge  $\Lambda$  abhängt:

$$\epsilon = \frac{\bar{e}^{\frac{3}{2}}}{\Lambda}. \quad (3.23)$$

Da die Ausdehnung der Turbulenzelemente durch den als Barriere fungierenden Erdboden begrenzt wird, ist die Längenskala  $\Lambda$  proportional zur Höhe  $z$ . Die Dissipation nimmt somit zum Erdboden hin zu. Für den Proportionalitätsfaktor wurden verschiedene Werte für das vorliegende Problem getestet. Die beste Übereinstimmung von simulierter und gemessener Reichweite der autobahninduzierten Turbulenz wurde einem Wert von 0,1 erreicht:

$$\epsilon = 0,1 \frac{\bar{e}^{\frac{3}{2}}}{z}. \quad (3.24)$$



Die Diffusionskoeffizienten in Gleichung 3.6 setzen sich additiv aus atmosphärischen und autobahninduzierten Anteilen zusammen (Gl. 2.45 und 2.46). Die autobahninduzierten Anteile  $K_{xx}^{AB}$  und  $K_{zz}^{AB}$  werden aus dem zweidimensionalen Feld der zeitabhängigen turbulenten kinetischen Energie bestimmt. Einem Vorschlag von Eskridge et al. (1979) folgend werden sie als Produkt einer charakteristischen Geschwindigkeit und einer charakteristischen Länge berechnet. Als charakteristische Geschwindigkeit wird die Quadratwurzel der wie beschrieben simulierten zusätzlichen turbulenten kinetischen Energie verwendet, als charakteristische Länge wird für den horizontalen Diffusionskoeffizienten die Fahrzeugbreite  $B_{Kfz}$ , für den vertikalen Diffusionskoeffizienten die Fahrzeughöhe  $H_{Kfz}$  verwendet:

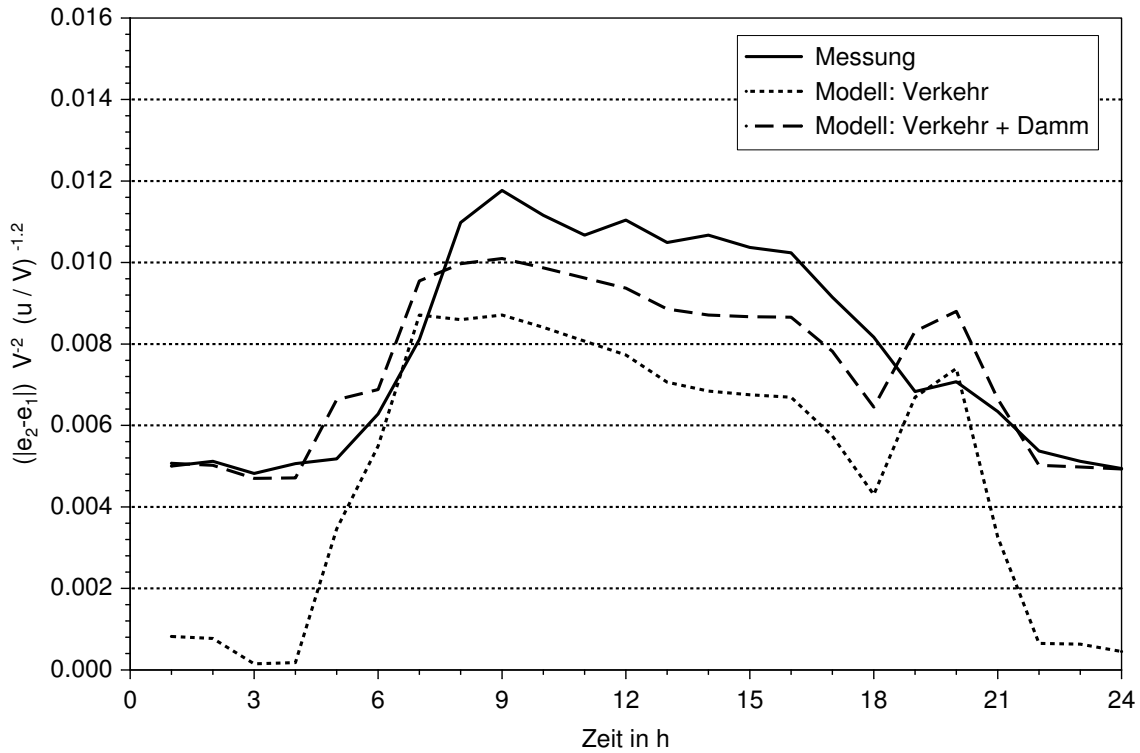
$$K_{xx}^{AB}(x, z) = B_{Kfz} \bar{e}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.25)$$

$$K_{zz}^{AB}(x, z) = H_{Kfz} \bar{e}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.26)$$

Die Verwendung der Fahrzeugbreite und -höhe als charakteristische Längen für den autobahninduzierten Anteil, der sich wiederum aus einem fahrzeuginduzierten und einem durch die Dammüberströmung verursachten Anteil zusammensetzt, lässt sich wie folgt begründen. Der fahrzeuginduzierte Anteil besteht aus Turbulenzelementen, die ungefähr von der Größe der Fahrzeugabmessungen sind. Daher schlugen bereits Eskridge et al. (1979) diese Vorgehensweise vor. Durch die Dammüberströmung können bisweilen auch größere Strukturen entstehen (z.B. Heldt (1991)). Für die Diffusion der zu Anfang auf relativ kleinem Wirbeldurchmesser befindlichen kurz zuvor emittierten Schadgase kommen jedoch nach der Argumentation von Kapitel 2.2.2 ebenfalls nur Wirbel von der ungefähren Größe der Fahrzeugabmessungen infrage. Daher ist die Verwendung von Fahrzeugbreite und -höhe als charakteristische Längen sinnvoll. Ergebnisse der Berechnung der turbulenten Diffusionskoeffizienten werden im nächsten Kapitel 3.4 vorgestellt.

Abbildung 3.12 zeigt Tagesgänge der normierten Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Mast 1 und Mast 2. Für die Simulation wurde ein geostrophischer Wind  $u_g = 4 \text{ m s}^{-1}$  vorgegeben, der den mittleren gemessenen Tagesgang der Windgeschwindigkeit in Bodennähe gut reproduzierte. Die Messung gibt die mittleren Verhältnisse an Wochentagen während der BABII-Messkampagne wieder. Während der verkehrsarmen Zeit zwischen 22 Uhr und 5 Uhr (vgl. Abb. 3.7 und 3.8) ist die Energiedifferenz nahezu konstant, aber signifikant von Null verschieden. Dieser Versatz ist auf die Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung zurückzuführen. Im weiteren folgt der zeitliche Verlauf weitgehend dem mittleren Tagesgang des Lkw-Verkehrs

(Abb. 3.8). Dies war aufgrund der relativ hohen Korrelation zwischen Energiedifferenz und Lkw-Verkehr (Abb. 3.10) zu erwarten. Von 5 Uhr an erfolgt ein starkes Ansteigen bis zu einem Maximum um 9 Uhr. Im Laufe des Tages gehen die Werte dann nur sehr leicht zurück. Zwischen 16 Uhr und 22 Uhr erfolgt ein beinahe kontinuierlicher Rückgang, der lediglich durch ein schwaches sekundäres Maximum um 19 Uhr unterbrochen wird. Dieses ist eine Folge des Tagesganges der atmosphärischen Schichtung. In den Abendstunden bildet sich infolge der schwächer werdenden Sonneneinstrahlung vom Boden her eine stabile Grenzschicht heraus, in der die turbulente Diffusion wesentlich geringer ist als in der zuvor existierenden konvektiven Mischungsschicht. Daher können einmal existierende Turbulenzelemente eine größere Lebensdauer erreichen, so dass trotz geringerer Produktion im Lee der Autobahn ein nochmaliges geringes Ansteigen der turbulenten kinetischen Energie beobachtet werden kann. Der Rückgang der turbulenten Diffusion in den Abendstunden bei gleichzeitigem Rückgang der Quellstärken ist ebenfalls für abendliche Maxima in den Konzentrationsfeldern emittierter Substanzen im Lee der Autobahn verantwortlich (vgl. Kap. 4.2.2). Eine zweite Kurve in Abbildung 3.12 zeigt einen wie in diesem Kapitel beschrieben modellierten Tagesgang der Energiedifferenz ohne die Berücksichtigung der Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung. Der Produktionsterm für die fahrzeuginduzierte Turbulenz  $P_V$  wurde dabei für Pkw und Lkw getrennt berechnet. Die jeweilige zeitliche Verkehrsdichte kann den Abbildungen 3.7 und 3.8 entnommen werden. Für die Fahrzeugparameter für Pkw (in Klammern: Lkw) wurden folgende Werte verwendet:  $c_w = 0,3$  (0,9);  $B_{Kfz} = 1,8$  (2,5) m;  $H_{Kfz} = 1,5$  (3,5) m;  $V = 120$  (80) km h<sup>-1</sup>. Der Tagesgang wird nun qualitativ bereits recht gut simuliert, allerdings liegen insbesondere nachts die modellierten Werte deutlich zu niedrig. In einer weiteren Modellsimulation wurde zusätzlich die Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung  $P_{\bar{U}}$  berücksichtigt mit den Parametern Höhe des Dammes  $H_D = 1$  m und Widerstandsbeiwert des Dammes  $c_{w,D} = 0,36$ . Dieser letztgenannte Wert wurde von Heldt (1991) für einen Hochwasserschutzdamm ermittelt. Der so simulierte Tagesgang gibt die Messung sehr gut wieder, insbesondere wird der nächtliche Versatz nun auch in den Modellergebnissen sichtbar. Die Abweichungen zwischen Rechnung und Messung bleiben durchweg unter 20 Prozent. Das sekundäre Maximum am Abend wird in den Modellsimulationen deutlich überschätzt, vermutlich die Folge einer etwas zu geringen Höhe der stabilen Grenzschicht zu diesem Zeitpunkt im Modell im Vergleich zu den Messungen, die naturgemäß bei sehr unterschiedlichen Bedeckungsgraden und damit auch unterschiedlichen Schichtungsbedingungen gewonnen wurden.



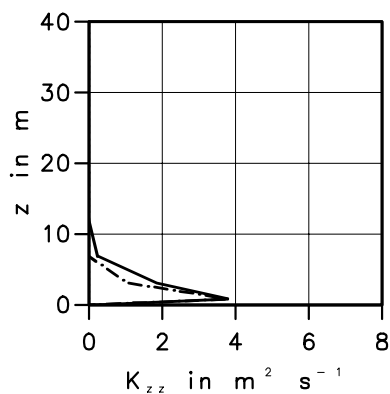
**Abbildung 3.12:** Mittlerer Tagesgang der normierten Differenz der an Mast 1 und Mast 2 gemessenen turbulenten kinetischen Energie an Wochentagen. Die gestrichelten Kurven zeigen die Simulationsergebnisse.

## 3.4 Vertikale und horizontale Diffusionskoeffizienten

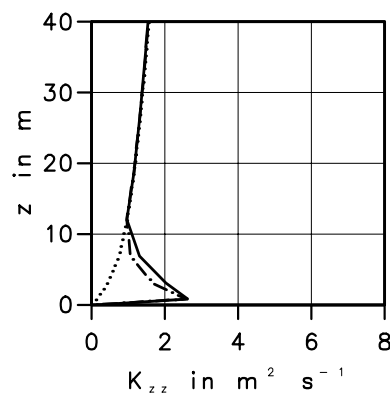
In diesem Kapitel werden Vertikalprofile der vertikalen und horizontalen Diffusionskoeffizienten, wie sie dem Ausbreitungsmodell zur Verfügung gestellt werden müssen, vorgestellt. Dabei werden insbesondere die Unterschiede zwischen den quellentfernungsabhängigen Diffusionskoeffizienten und den autobahninduzierten Diffusionskoeffizienten aufgezeigt. Die quellentfernungsabhängigen Diffusionskoeffizienten werden gemäß der Beschreibung in Kapitel 2.2.2 berechnet, die autobahninduzierten Diffusionskoeffizienten gemäß der Formulierung im vorhergehenden Kapitel 3.3. Letztere beziehen sich auf einen mittleren Wochentag. Als Antrieb wurde dem Strömungsmodell eine straßensenkrechte geostrophische Windkomponente von  $4 \text{ m s}^{-1}$  vorgegeben. Die Auswirkungen der unterschiedlichen Parametrisierungen auf die Konzentrationen werden anhand von Vertikalprofilen der CO-Konzentration in Kapitel 4.1 untersucht. Dort findet man auch einen Vergleich von gemessenen und simulierten Profilen.

— mit Verkehr und Damm    - - - mit Verkehr, ohne Damm    ..... Standard

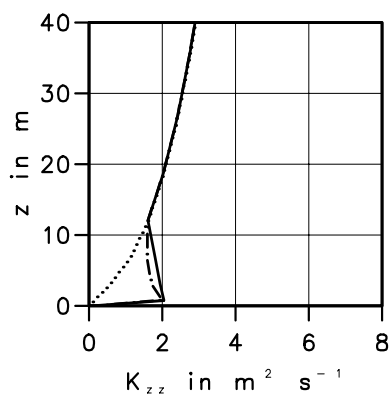
a)  $x=0$  m



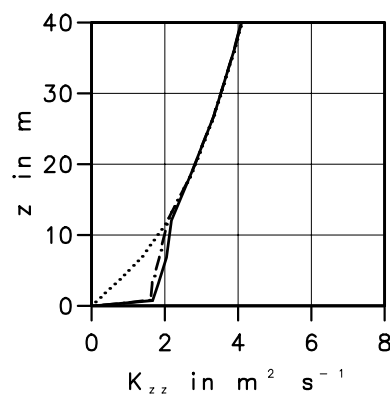
b)  $x=8$  m



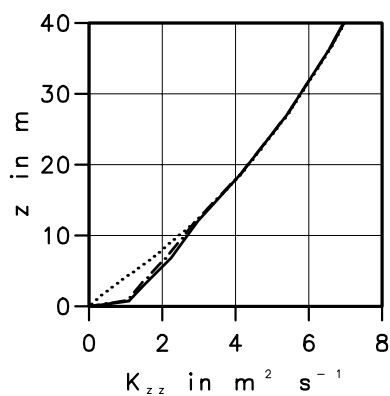
c)  $x=16$  m



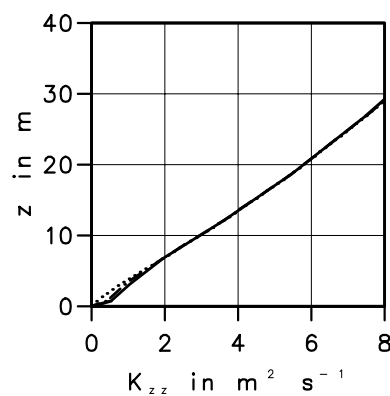
d)  $x=25$  m



e)  $x=50$  m



f)  $x=100$  m



**Abbildung 3.13:** Vertikaler Diffusionskoeffizient  $K_{zz}$  in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn für die Standardparametrisierung, mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und Turbulenz infolge der Dammüberströmung bei stark labiler Schichtung um 13 Uhr.

In Abbildung 3.13 sind Vertikalprofile des vertikalen Diffusionskoeffizienten  $K_{zz}$  um 13 Uhr dargestellt. Zu diesem Zeitpunkt ist die thermische Schichtung infolge der großen Sonneneinstrahlung sehr labil, so dass neben der mechanisch erzeugten auch thermisch produzierte Turbulenz in der Atmosphäre vorhanden ist. Jedes der einzelnen Diagramme a) bis f) der Abbildung 3.13 repräsentiert eine andere Entfernung zur Mitte der Autobahn, beginnend bei 0 m, was unmittelbar über der Fahrbahn bedeutet, bis hin zu 100 m Entfernung. In jedes Diagramm sind drei Graphen eingezeichnet, die drei verschiedenen Parametrisierungen entsprechen. Die in der Legende mit Standard bezeichnete Parametrisierung ist die quellentfernungsabhängige Parametrisierung des Diffusionskoeffizienten (punktierte Linie). Ein weiterer Graph zeigt den vertikalen Diffusionskoeffizienten unter Berücksichtigung der fahrzeuginduzierten Turbulenz (strichpunktierte Linie). Die durchgezogene Linie zeigt die volle Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz, in der neben der fahrzeuginduzierten Turbulenz auch noch die Turbulenzproduktion infolge der Überströmung des Dammes, auf dem die Autobahn verläuft, berücksichtigt ist. Die vertikalen Diffusionskoeffizienten der quellentfernungsabhängigen Parametrisierung nehmen mit zunehmendem Abstand von der Autobahn kontinuierlich zu. An der Quelle selbst sind sie Null entsprechend der Vorstellung eines infinitesimal kleinen von Emissionen erfüllten Volumens zu Beginn des Ausbreitungsprozesses. Die Zunahme ist für Quellentfernungen von ca. 500 m abgeschlossen (ohne Abbildung), da dann das komplette Spektrum der Turbulenzelemente in der Atmosphäre berücksichtigt ist. Charakteristisch für  $K_{zz}$  ist des Weiteren die Zunahme mit der Höhe. Dies ist eine Folge der Beschränkung der Turbulenzelemente in vertikaler Richtung durch den festen Erdboden. Unterhalb einer Höhe von ca. 15 m wird in Nähe der Autobahn der Einfluss der autobahninduzierten Turbulenz sichtbar. Dieser ist in einer Entfernung von 100 m nahezu völlig abgeklungen, was aufgrund der Messungen (Kap. 3.2.1) erwartet werden konnte. Unmittelbar über dem Boden ist dabei die fahrzeuginduzierte Turbulenz dominant, darüber führt die Turbulenzproduktion infolge der Überströmung des Dammes zu einer signifikanten Erhöhung der Diffusionskoeffizienten. Nach den Erkenntnissen von Kapitel 3.2.1 liegen beide Effekte bezüglich der turbulenten kinetischen Energie für hohe Verkehrsdichten in der gleichen Größenordnung. Aufgrund der Verwendung der Quadratwurzel der turbulenten kinetischen Energie als charakteristische Geschwindigkeit (Gl. 3.25 und 3.26) entspricht eine Verdopplung der Energie einer Erhöhung des Diffusionskoeffizienten um ca. 40 %. Die autobahninduzierte Turbulenz ist somit selbst im Falle stark labiler Schichtung und entsprechend großer atmosphärischer Diffusionskoeffizienten im Nahbereich der Autobahn der dominierende Faktor bei der Bestimmung der bodennahen Diffusionskoeffizienten

und darf bei der Ausbreitungsrechnung keinesfalls vernachlässigt werden.

Abbildung 3.14 zeigt wiederum Vertikalprofile des vertikalen Diffusionskoeffizienten  $K_{zz}$ , nun aber um 18 Uhr bei nur noch schwach labiler Schichtung. Die atmosphärischen Diffusionskoeffizienten der quellentfernungsabhängigen Parametrisierung sind im Vergleich zu 13 Uhr (Abb. 3.13) deutlich geringer entsprechend der schwächeren atmosphärischen Turbulenz infolge geringerer thermischer Produktion. Da der Lkw-Verkehr nun gegenüber 13 Uhr um ca. 50 % zurückgegangen ist, ist die Turbulenzproduktion infolge der Überströmung des Damms für einen geringfügig größeren Teil der autobahninduzierten Turbulenz verantwortlich. Mit abnehmendem Verkehr nimmt somit die Bedeutung der Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung zu. Generell ist überdies bei weniger labiler Schichtung mit einer Zunahme der Bedeutung der gesamten autobahninduzierten Turbulenz zu rechnen, da die atmosphärischen Diffusionskoeffizienten kleiner sind.

Bei stabiler Schichtung und geringerer Verkehrsdichte um 22 Uhr (Abb. 3.15, gegenüber Abb. 3.13 und 3.14 geänderte Abszissenskalierung) sind die vertikalen Diffusionskoeffizienten im Nahbereich der Autobahn kleiner als tagsüber. Neben der geringeren fahrzeuginduzierten Turbulenz ist ebenfalls die windgeschwindigkeitsabhängige Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung geringer. Noch wesentlich deutlicher jedoch sind die atmosphärischen Diffusionskoeffizienten der quellentfernungsabhängigen Parametrisierung zurückgegangen. Selbst in einer Entfernung von der Autobahn von 100 m (Abb. 3.15f) sind bei der gewählten Skalierung die Diffusionskoeffizienten kaum zu erkennen, da sie weniger als  $0,1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  betragen. Die relative Bedeutung der Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz für den Ausbreitungsprozess ist als sehr groß anzusehen, da sie im quellnahen Bereich ganz eindeutig dominiert. Die Reichweite der autobahninduzierten Turbulenz ist nun geringer, da die Windgeschwindigkeiten geringer und damit die Transportzeiten für an der Autobahn erzeugte Wirbel größer sind.

Zum Vergleich sind in Abbildung 3.16 Vertikalprofile des horizontalen Diffusionskoeffizienten  $K_{xx}$  um 13 Uhr dargestellt. Generell ist die Bedeutung der turbulenten Diffusion in Richtung der mittleren Strömung im Vergleich zur vertikalen Richtung in der Ausbreitungsrechnung als wesentlich geringer einzustufen. Bei der herrschenden sehr labilen Schichtung nehmen die horizontalen Diffusionskoeffizienten sehr stark mit

— mit Verkehr und Damm

- - - mit Verkehr, ohne Damm

..... Standard

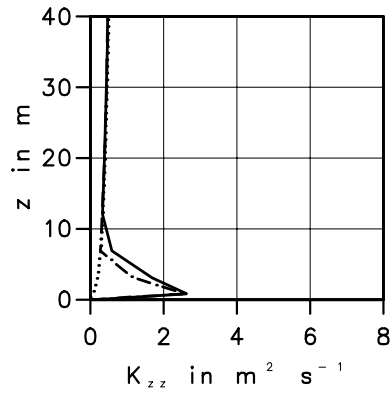
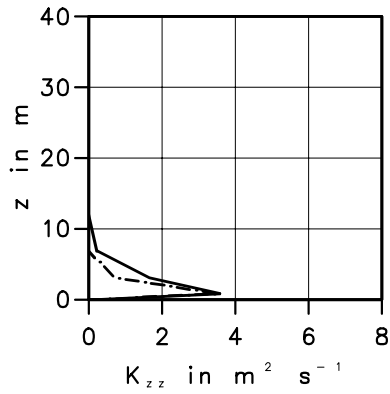
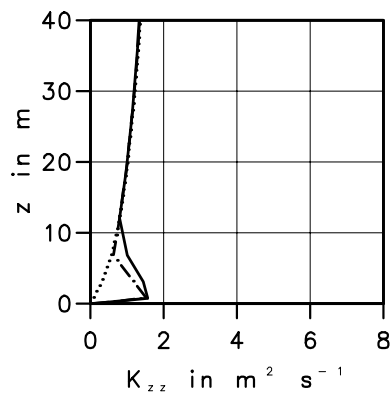
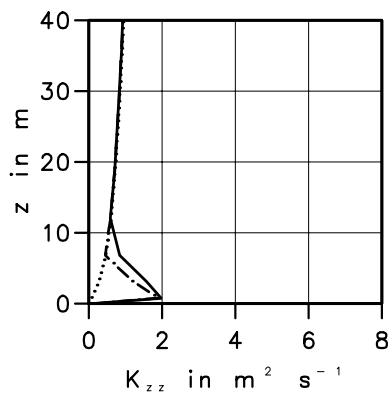
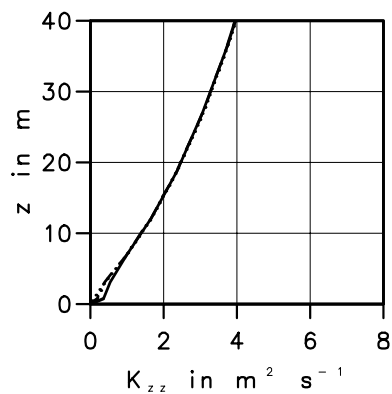
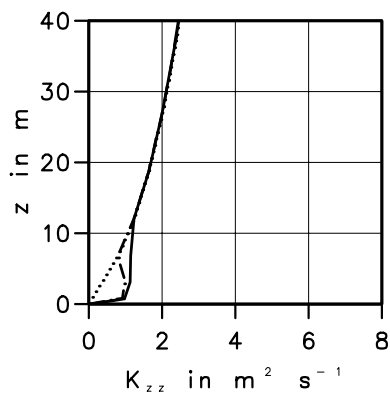
a)  $x=0$  mb)  $x=8$  mc)  $x=16$  md)  $x=25$  me)  $x=50$  mf)  $x=100$  m

Abbildung 3.14: Wie Abbildung 3.13, aber bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr.

— mit Verkehr und Damm

- - - mit Verkehr, ohne Damm

..... Standard

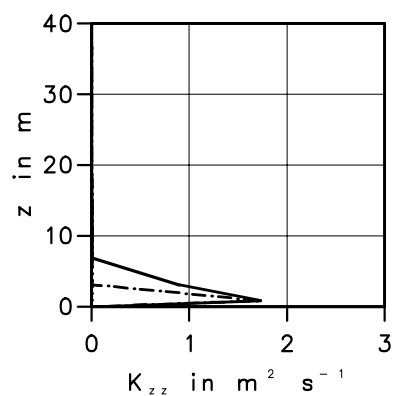
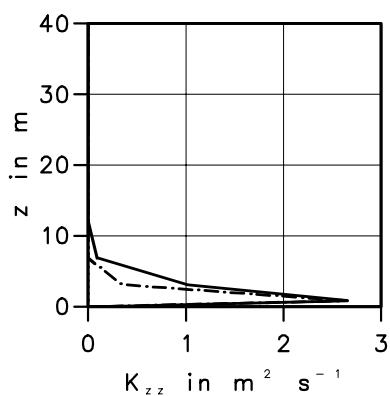
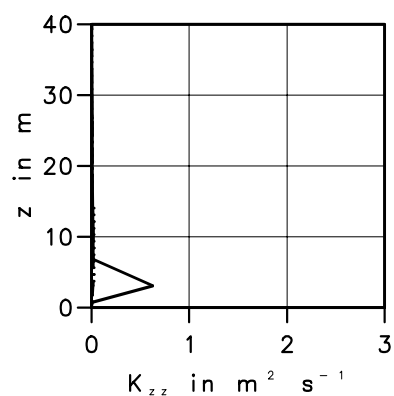
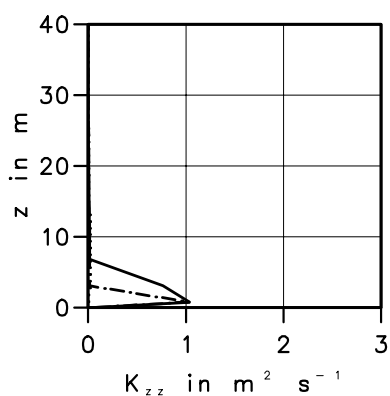
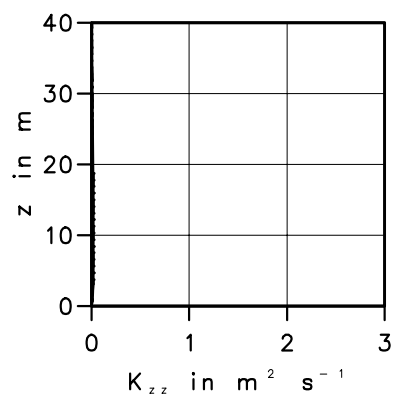
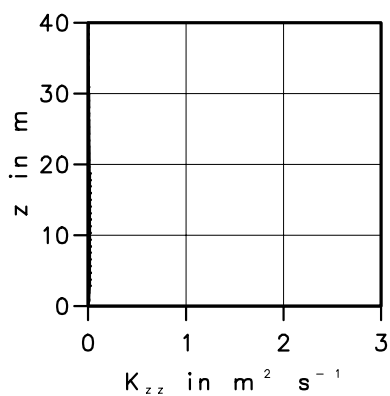
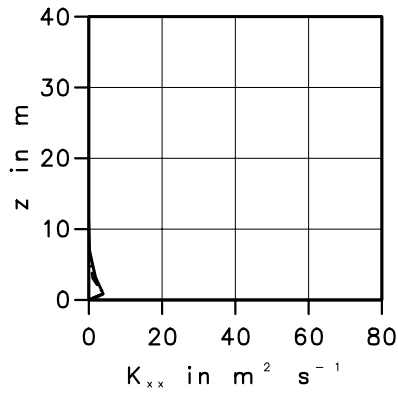
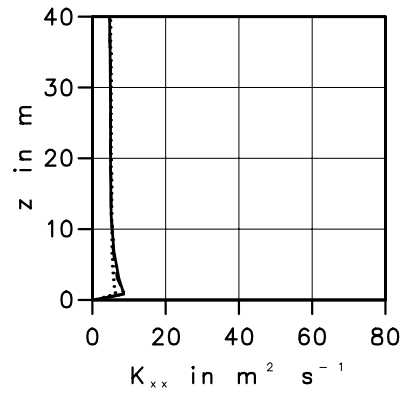
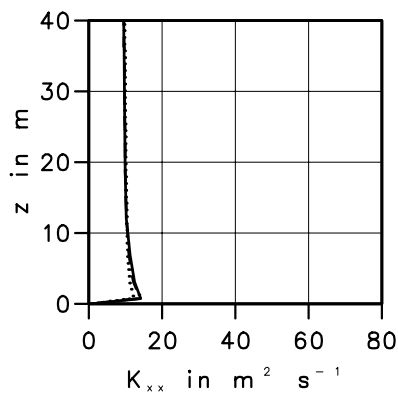
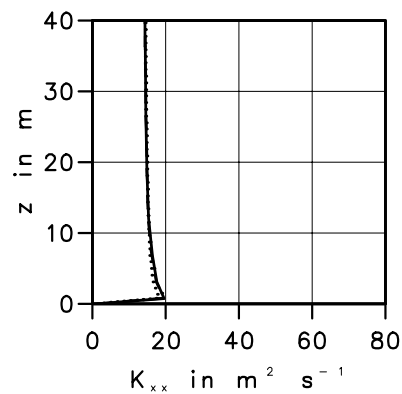
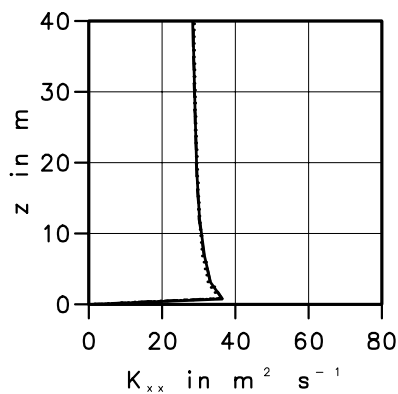
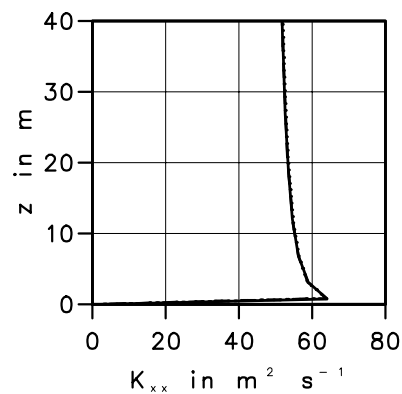
a)  $x=0$  mb)  $x=8$  mc)  $x=16$  md)  $x=25$  me)  $x=50$  mf)  $x=100$  m

Abbildung 3.15: Wie Abbildung 3.13, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr.



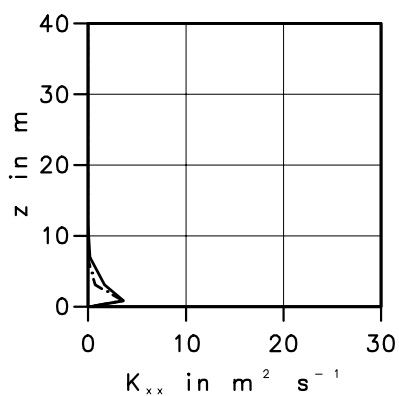
— mit Verkehr und Damm    - - - mit Verkehr, ohne Damm    ..... Standard

a)  $x=0$  mb)  $x=8$  mc)  $x=16$  md)  $x=25$  me)  $x=50$  mf)  $x=100$  m

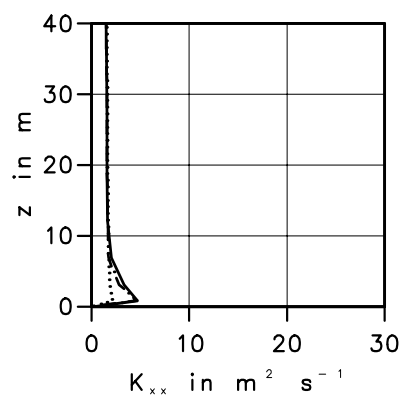
**Abbildung 3.16:** Horizontaler Diffusionskoeffizient  $K_{xx}$  in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn für die Standardparametrisierung, mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und Turbulenz infolge der Dammüberströmung um 13 Uhr.

— mit Verkehr und Damm    - - - mit Verkehr, ohne Damm    ..... Standard

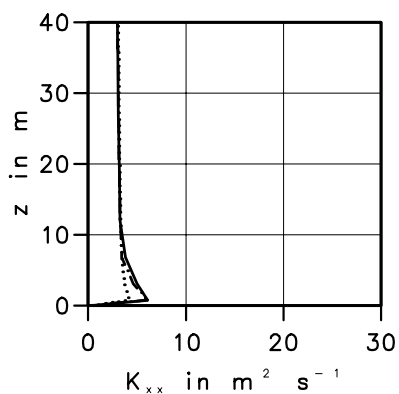
a)  $x=0$  m



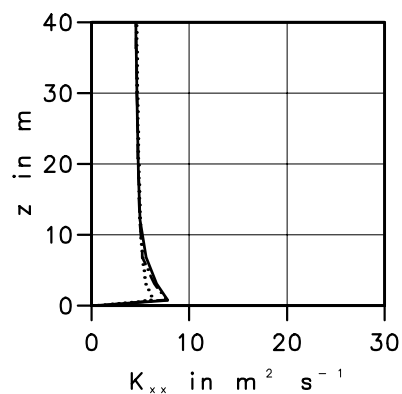
b)  $x=8$  m



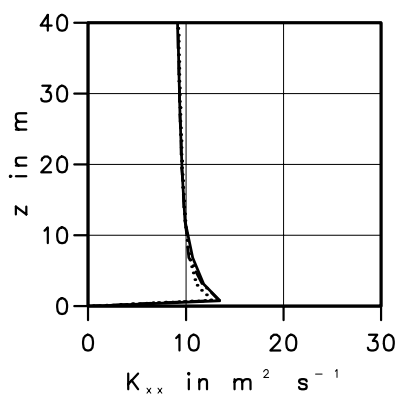
c)  $x=16$  m



d)  $x=25$  m



e)  $x=50$  m



f)  $x=100$  m

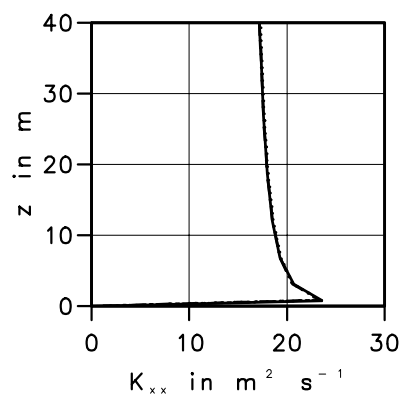


Abbildung 3.17: Wie Abbildung 3.16, aber bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr.

— mit Verkehr und Damm

- - - mit Verkehr, ohne Damm

..... Standard

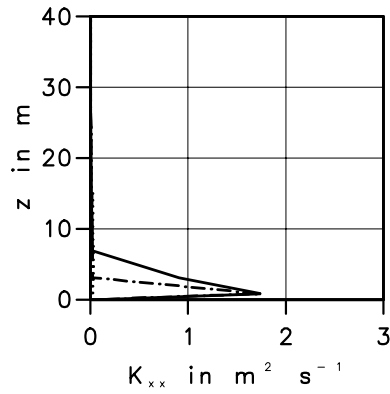
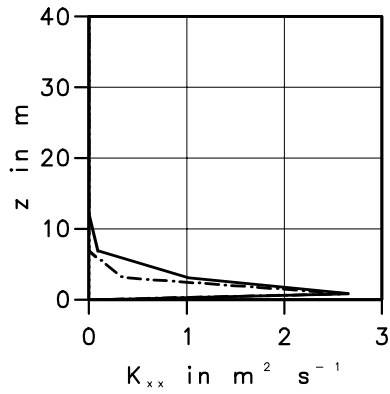
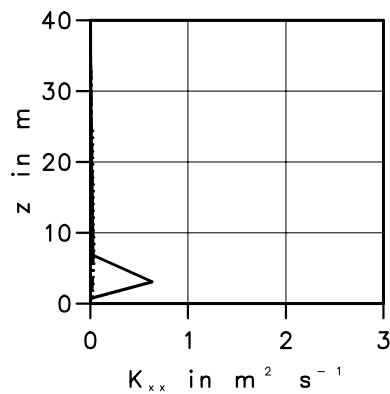
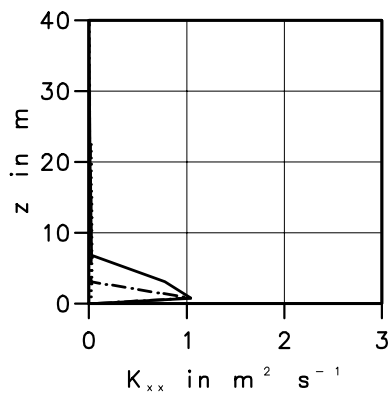
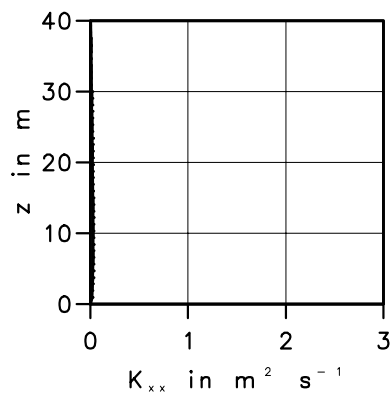
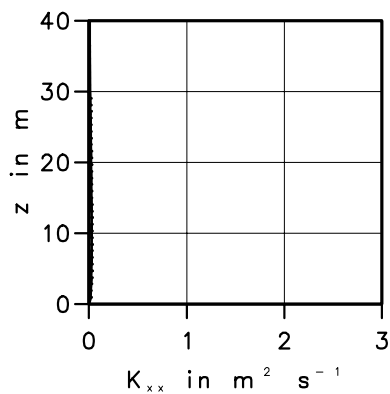
a)  $x=0$  mb)  $x=8$  mc)  $x=16$  md)  $x=25$  me)  $x=50$  mf)  $x=100$  m

Abbildung 3.18: Wie Abbildung 3.16, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr.

der Quellentfernung zu, so dass die autobahninduzierte Turbulenz mit Ausnahme des unmittelbaren Quellbereichs eine wesentlich geringere Rolle spielt als bei den zuvor analysierten vertikalen Diffusionskoeffizienten. Sie erreichen etwa um eine Größenordnung höhere Werte im Vergleich zu den vertikalen Diffusionskoeffizienten und weisen im Gegensatz zu diesen keine deutliche Höhenabhängigkeit auf. Dies lässt sich mit der Vorstellung erklären, dass der Erdboden für Turbulenzelemente mit vertikaler Rotationsachse keine wirkliche Beschränkung darstellt.

Bei nur leicht labiler Schichtung um 18 Uhr (Abb. 3.17, gegenüber Abb. 3.16 geänderte Abszissenskalierung) erreichen die horizontalen Diffusionskoeffizienten nun deutlich geringere Werte als um 13 Uhr. Der Einfluss der autobahninduzierten Turbulenz lässt sich in den Diagrammen bei größeren Quellentfernungen noch erkennen. Im Vergleich zur vertikalen Komponente (Abb. 3.14) ist er allerdings jetzt ebenfalls deutlich geringer.

Bei stabiler Schichtung um 22 Uhr (Abb. 3.18, gegenüber Abb. 3.17 geänderte Abszissenskalierung) sind die atmosphärischen horizontalen Diffusionskoeffizienten der quellentfernungsabhängigen Parametrisierung sehr gering. Die Bedeutung der autobahninduzierten Turbulenz ist in diesem Fall daher ähnlich groß wie bei den vertikalen Diffusionskoeffizienten.

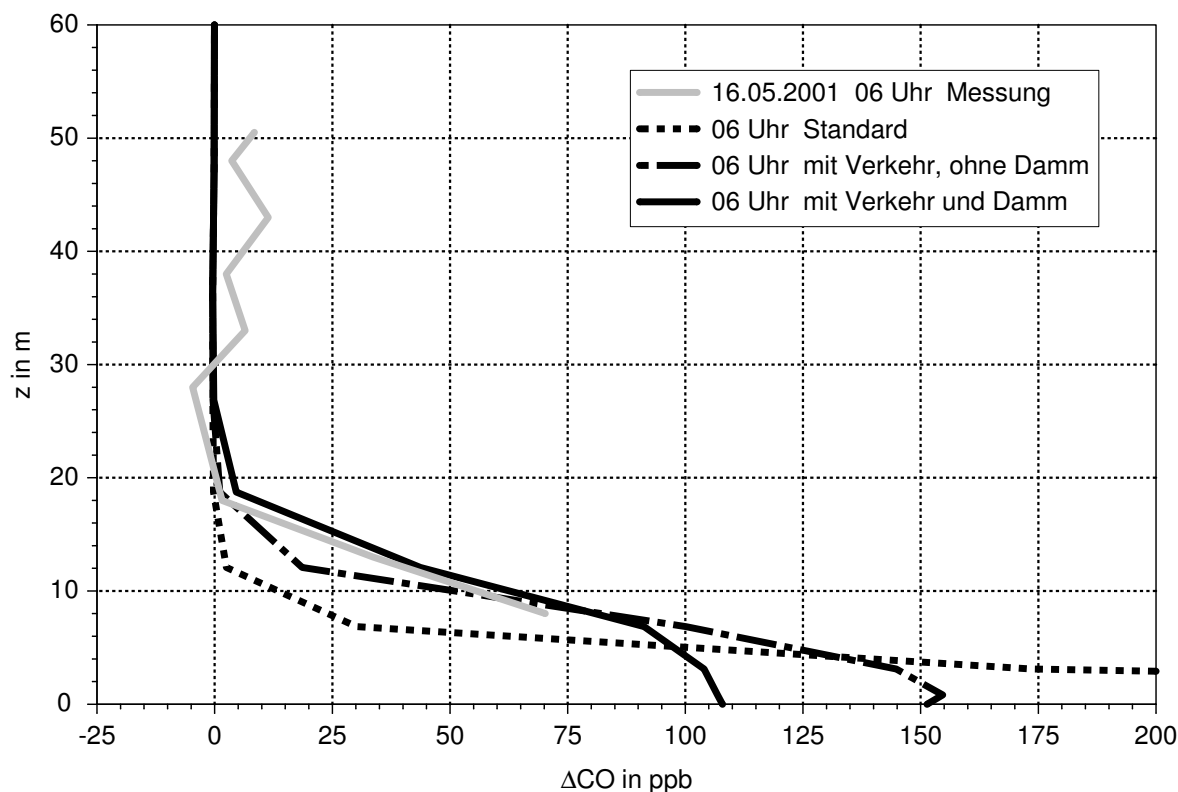
Zusammenfassend lässt sich anhand der Diffusionskoeffizienten sagen, dass die Bedeutung der autobahninduzierten Turbulenz für den Ausbreitungsprozess mit der Stabilität der Atmosphäre zunimmt. Des Weiteren steigt die Bedeutung der fahrzeuginduzierten Turbulenz erwartungsgemäß mit zunehmendem Verkehrsaufkommen bei gleicher Fahrgeschwindigkeit. Die Bedeutung der zusätzlichen Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung ist nachts trotz geringerer bodennaher Windgeschwindigkeit höher, da die fahrzeuginduzierte Turbulenz dann infolge wesentlich geringeren Verkehrsaufkommens schwächer ist und vor allem die atmosphärische Turbulenz sehr viel geringer ist. Die autobahninduzierten vertikalen Diffusionskoeffizienten sind im Vergleich zu den autobahninduzierten horizontalen Diffusionskoeffizienten bei labiler thermischer Schichtung bedeutsamer.

# 4 Berechnete Konzentrationsverteilungen gasförmiger Substanzen

In diesem Kapitel werden Ergebnisse der Modellsimulationen präsentiert. Zunächst werden mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz simulierte CO-Vertikalprofile vorgestellt. CO kann auf der vorliegenden räumlichen bzw. zeitlichen Skala als chemisch inert angesehen werden. Die verwendeten turbulenten Diffusionskoeffizienten wurden in Kapitel 3.4 dargestellt. Anhand eines Vergleichs mit gemessenen Profilen wird die Notwendigkeit dieser zusätzlichen Parametrisierung verdeutlicht. Der geostrophische Wind im Modell wurde dabei so vorgegeben, dass eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen simulierter und gemessener bodennaher Windgeschwindigkeit auftrat. In einem weiteren Unterkapitel werden mit der neuen Parametrisierung simulierte Tagesgänge, Vertikal- und Horizontalprofile verschiedener gasförmiger Substanzen beidseitig der Autobahn gezeigt. Für die Modellsimulationen wurden die Emissionen der Vorabschätzung des Vorexperiments nach Kühlwein et al. (1998) verwendet.

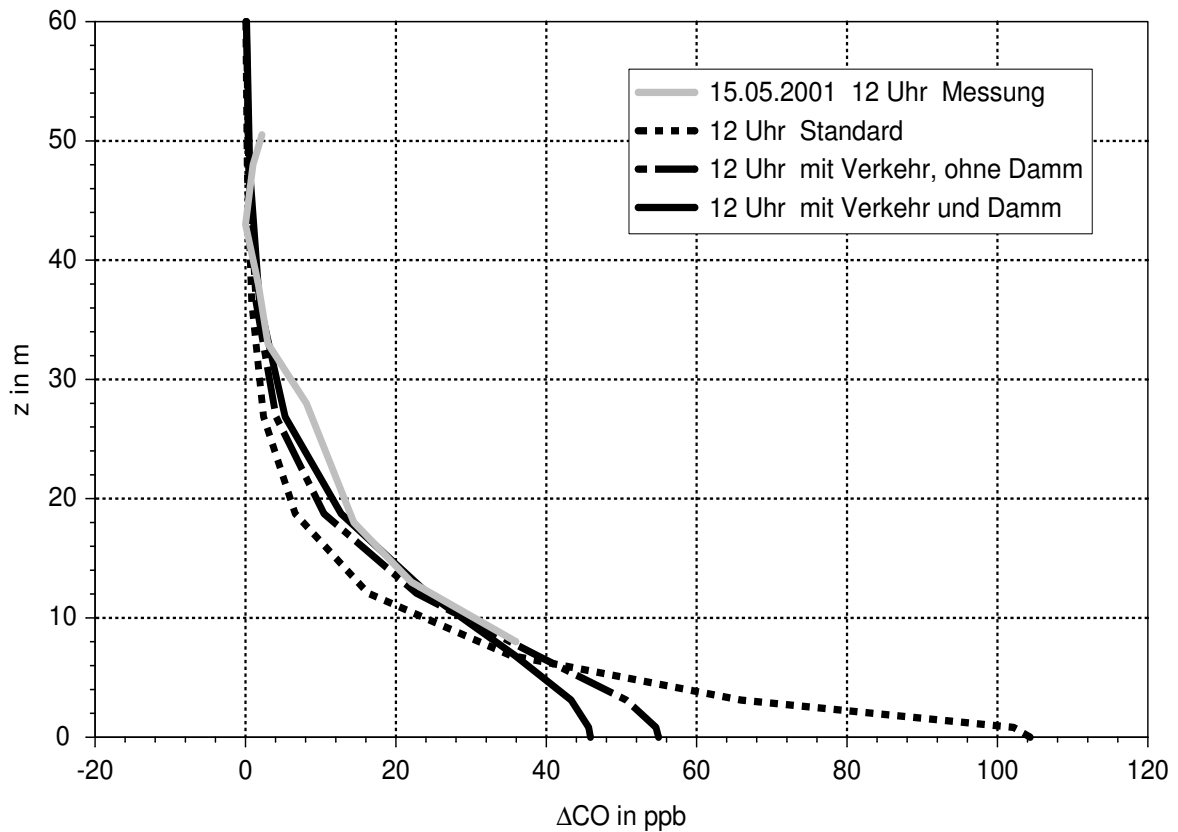
## 4.1 Gemessene und simulierte CO-Vertikalprofile

In Abbildung 4.1 sind gemessene und simulierte Vertikalprofile der Differenz der CO-Konzentration zwischen Lee und Luv der Autobahn am 16.05.2001 um 6 Uhr bei neutraler Schichtung dargestellt. Die Messungen wurden dabei über ein zweistündiges Intervall von 5 Uhr bis 7 Uhr gemittelt. Bei dem in diesem Zeitintervall herrschenden Südwestwind traten erwartungsgemäß höhere Konzentrationen am Turm auf der Nordostseite auf. Der Turm auf der Nordostseite stand 60 m vom äußeren Rand und somit ca. 80 m von der Mitte der Autobahn entfernt (vgl. Kap. 3.1). Die gemessene Fahnenhöhe beträgt gemäß Abbildung 4.1 etwa 18 m. Es wurden drei verschiedene Simulationen durchgeführt. Die in der Abbildung 4.1 mit Standard bezeichnete Kurve gibt die Ergebnisse einer Simulation nur mit quellentfernungsabhängiger Parametrisierung wieder. Ein weiterer Graph illustriert die Wirkung der zusätzlich berücksichtigten



**Abbildung 4.1:** Gemessene und simulierte Vertikalprofile der Differenz der  $CO$ -Konzentration zwischen den Türmen auf der Nordost- und Südwestseite am 16.05.2001 um 6 Uhr bei neutraler Schichtung.

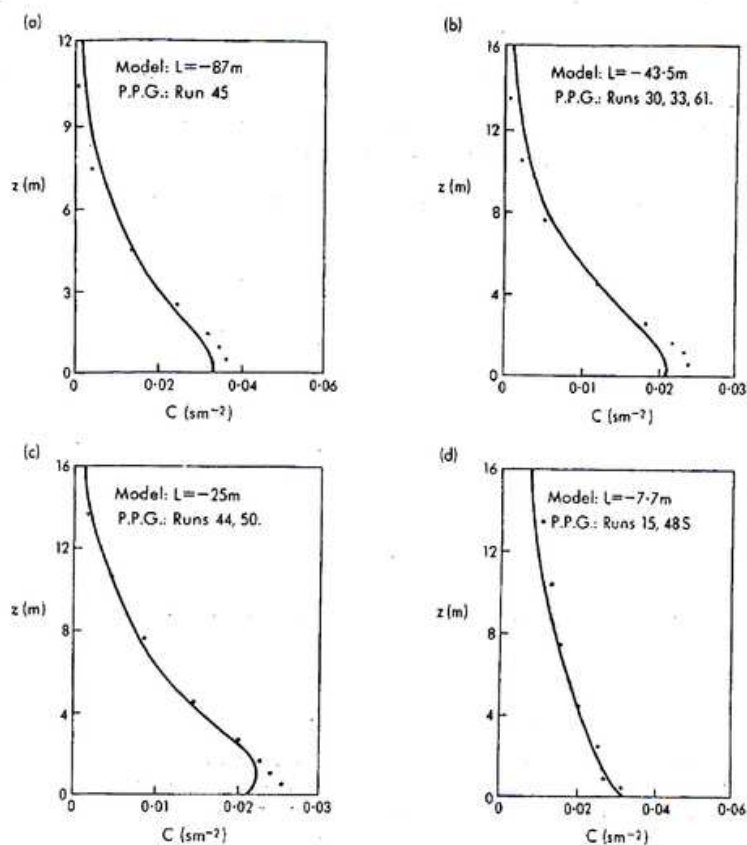
fahrzeuginduzierten Turbulenz, ein vierter die Wirkung sowohl der fahrzeuginduzierten als auch der durch die Dammüberströmung produzierten Turbulenz. Ohne die autobahninduzierten Effekte ist die Fahnenhöhe mit ca. 12 m deutlich zu niedrig. In diesem Fall werden am Boden im Vergleich zur Messung mit mehr als 200 ppb viel zu hohe Konzentrationen simuliert. Die Parametrisierung der fahrzeuginduzierten Turbulenz führt zu einer wesentlich größeren vertikalen Durchmischung und zu einem Ansteigen der Fahnenhöhe. Die geringste Abweichung zur Messung weist die komplette Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz auf. Die geringe Fahnenhöhe von 12 m im Standardfall der quellentfernungsabhängigen Parametrisierung ist jedoch als realistische Lösung einer ruhenden Linienquelle in ebenem Gelände anzusehen. Beim Ausbreitungsexperiment Project Prairie Grass (Barad 1958) gemessene Vertikalprofile der Konzentration  $C$  eines Tracers im Lee einer Linienquelle weisen bei neutraler Schichtung in einer Quellentfernung von 100 m ebenfalls charakteristische Fahnenhöhen von ca. 12 m auf, wenn man die Fahnenhöhen für leicht labile Schichtung (Abb. 4.3a) und leicht stabile Schichtung (Abb. 4.5c) betrachtet. In diesen Abbildungen ist die senkrecht zur mittleren Strömung aufintegrierte und mit der Quellstärke normierte Konzentration



**Abbildung 4.2:** Wie Abbildung 4.1, aber am 15.05.2001 um 12 Uhr bei labiler Schichtung.

$C$  aufgetragen.

Bei labiler Schichtung am 15.05.2001 um 12 Uhr ist die Höhe der Abgasfahne im Lee der Autobahn mit ca. 35 bis 40 m deutlich größer als bei neutraler Schichtung (Abb. 4.2). Die große atmosphärische Turbulenz führt nun zu einer starken vertikalen Durchmischung in kurzer Zeit. Dennoch haben fahrzeuginduzierte Turbulenz und Überströmungseffekt insbesondere bodennah einen großen Einfluss auf das Konzentrationsprofil. Die geringste Abweichung zur Messung zeigt wiederum die komplette Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz. Das bodennahe Konzentrationsmaximum ist dabei trotz höherer Emissionen um diese Zeit deutlich geringer als im zuvor gezeigten Fall mit neutraler Schichtung. Da die Masten beim Project Prairie Grass nur 16 m hoch waren, kann die genaue Fahnenhöhe für den Fall der labilen Schichtung in den Mittagsstunden nicht aus Abbildung 4.3d abgelesen werden. Man erkennt jedoch an der Steigung des Graphen, dass auch dort die Fahnenhöhe sehr viel größer als 16 m gewesen sein muss. Des Weiteren tritt auch hier das Maximum der Konzentration am untersten Messpunkt auf wie bei den simulierten Profilen. Bei stabiler Schichtung am 18.05.2001 um 20 Uhr (Abb. 4.4) ist die turbulente Durchmischung der



**Abbildung 4.3:** Vertikalprofile der Konzentration eines Tracers in einer Entfernung von 100 m von einer Linienquelle. Vergleich von Messdaten (Punkte) des Project Prairie Grass und Modellrechnungen (Linie) mit einem Lagrange'schen Partikelmodell (Ley und Thomson 1983). Von a) nach d) zunehmend labile Schichtung.

ungestörten Atmosphäre nun noch geringer als bei neutraler Schichtung. Die Folge ist eine sehr geringe simulierte Fahnenhöhe in der Größenordnung zwischen 7 m und 10 m bei Verwendung der Standardparametrisierung. Beim Project Prairie Grass wurden bei stabiler Schichtung ähnlich niedrige Fahnenhöhen detektiert (Abb. 4.5a und 4.5b). Die bei BABII gemessene Fahnenhöhe betrug jedoch wie bei neutraler Schichtung ca. 18 m. Während die Modellsimulation mit fahrzeuginduzierter Turbulenz noch eine zu geringe Durchmischung und somit eine zu geringe Fahnenhöhe liefert, führt die zusätzliche Berücksichtigung der Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung zu einer guten Reproduktion der Messung. Insbesondere in den Abend- und Nachtstunden bei stabiler Schichtung muss der Effekt der Dammüberströmung berücksichtigt werden, die fahrzeuginduzierte Turbulenz alleine führt bei geringerem Verkehrsaufkommen zu einer unzureichenden Durchmischung.



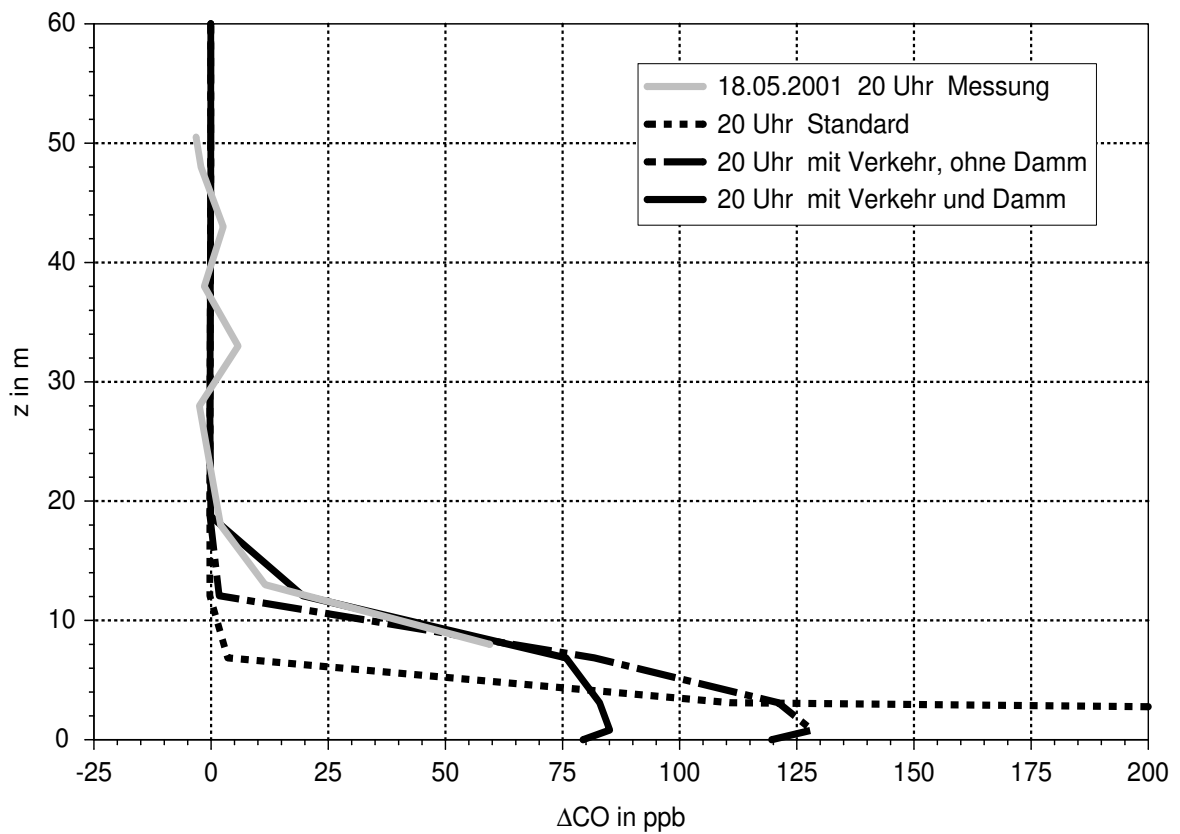


Abbildung 4.4: Wie Abbildung 4.1, aber am 18.05.2001 um 20 Uhr bei stabiler Schichtung.

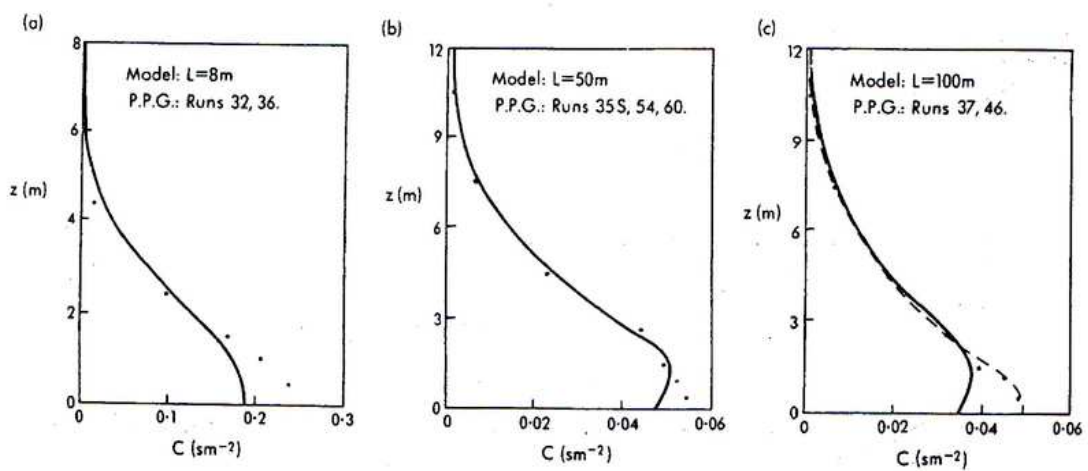


Abbildung 4.5: Vertikalprofile der Konzentration eines Tracers in einer Entfernung von 100 m von einer Linienquelle. Vergleich von Messdaten (Punkte) des Project Prairie Grass und Modellrechnungen (Linien) mit einem Lagrange'schen Partikelmodell (Ley und Thomson 1983). Von a) nach c) abnehmend stabile Schichtung.

## 4.2 Konzentrationsverteilungen ausgewählter Substanzen

### 4.2.1 Die Auswahl der Substanzen

Das beschriebene Modellsystem ermöglicht es, die räumlichen und zeitlichen Verteilungen der wichtigsten Substanzen zu berechnen. Dies ist von großem Interesse, da ein Teil der Substanzen nicht oder zumindest nicht in der erwünschten räumlichen und zeitlichen Auflösung gemessen werden kann. In diesem Kapitel werden Konzentrationen von verschiedenen z.T. reaktiven Substanzen dargestellt, deren Konzentrationsverteilungen von den Emissionen des Verkehrs auf der Autobahn modifiziert werden. Unter den Emissionen sind Substanzen, die auf der betrachteten räumlichen und zeitlichen Skala als chemisch inert betrachtet werden können. Diese unterliegen daher einem reinen Transportvorgang. Andere emittierte Substanzen reagieren schnell mit der Umgebungsluft und weisen daher andere Abklingraten mit der Entfernung auf als inerte Substanzen. Infolge solcher chemischer Vorgänge wird die Autobahn ebenfalls im Konzentrationsfeld verschiedener nicht emittierter Substanzen sichtbar. Anhand von Tagessgängen, Vertikal- und Horizontalprofilen werden die zeitlich und räumlich variablen Konzentrationsfelder einiger bedeutender Substanzen diskutiert.

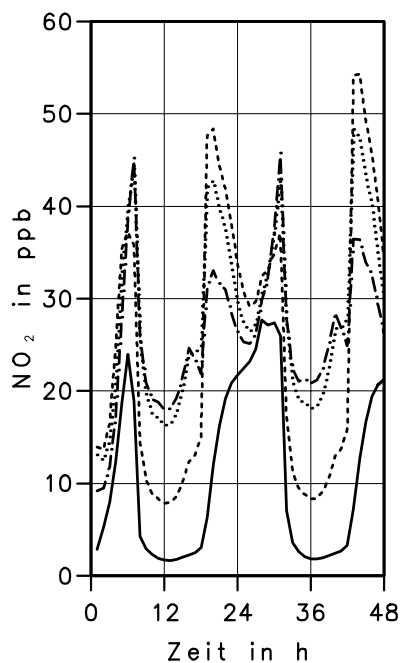
Kohlenmonoxid (CO) ist neben den Stickoxiden ( $\text{NO}_x$ ) ein Hauptbestandteil von Kraftfahrzeugemissionen. Bei der vorliegenden geringen Modellgebietsgröße kann es als chemisch inert angesehen werden. In hohen Konzentrationen wirkt es sehr giftig auf den menschlichen Organismus. Mit Stickoxide bezeichnet man die Summe aus Stickstoffmonoxid (NO) und Stickstoffdioxid ( $\text{NO}_2$ ). Das Verhältnis von NO zu  $\text{NO}_2$  im Abgas selbst liegt im Mittel bei 9:1, d.h. es wird kaum  $\text{NO}_2$  direkt emittiert. Das emittierte NO reagiert u.a. sehr schnell mit Ozon ( $\text{O}_3$ ) zu  $\text{NO}_2$ . Als Beispiel für eine weitere stickstoffhaltige Substanz mit bedeutender Konzentrationsänderung nach Überströmung der Autobahn wird die salpetrige Säure (HONO) dargestellt. Ihre Bedeutung in der Troposphäre besteht in ihrer Funktion als OH-Quelle infolge der Photolysierung von HONO. Gebildet wird sie im verwendeten Chemiemodell ausschließlich durch eine Reaktion von NO mit dem Hydroxylradikal (OH). In der jüngsten Vergangenheit sind jedoch weitere Quellen von HONO in der Atmosphäre entdeckt worden (Vogel et al. 2002). Zum einen wird HONO nach neuesten Erkenntnissen durch Verbrennungsprozesse direkt emittiert. Des Weiteren existiert ein Bildungsmechanismus durch heterogene Reaktionen an Partikeloberflächen und am Erdboden. Zusätzlich vermuten Vogel et al.

(2002) eine weitere photolytische Quelle von HONO. Alle dargestellten zeitlichen und räumlichen Konzentrationsverteilungen von HONO sind somit unter diesem Vorbehalt anzusehen. OH ist eine extrem reaktionsfreudige Substanz, die bei der Selbstreinigung der Atmosphäre eine fundamentale Rolle spielt. Es reagiert mit nahezu allen anderen Substanzen und wird durch verschiedene Photolyseraktionen gebildet. Ähnlich verhält es sich beim Hydroperoxylradikal ( $\text{HO}_2$ ). Als Beispiel für einen emittierten Kohlenwasserstoff wird die Modells substanz TOL dargestellt. Sie enthält neben Toluol die gesundheitsschädliche Substanz Benzol, für die strenge Grenzwerte gelten. In der nächtlichen Grenzschicht sind die Stickstoffverbindungen Nitratradikal ( $\text{NO}_3$ ) und Distickstoffpentoxid ( $\text{N}_2\text{O}_5$ ) für den Stickstoffkreislauf von Bedeutung. Tagsüber wird  $\text{NO}_3$  sehr schnell photolysiert und kommt daher nur in verschwindend geringen Konzentrationen vor.

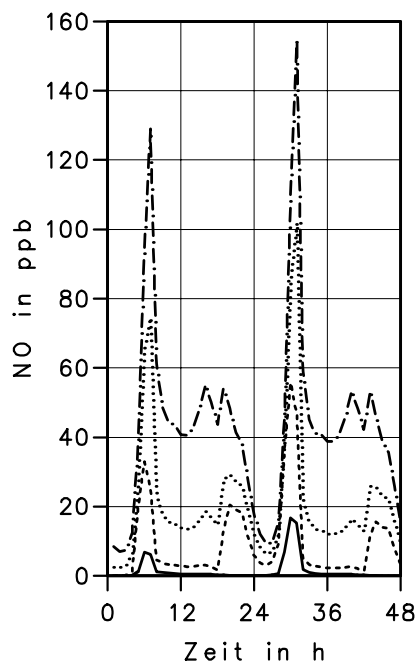
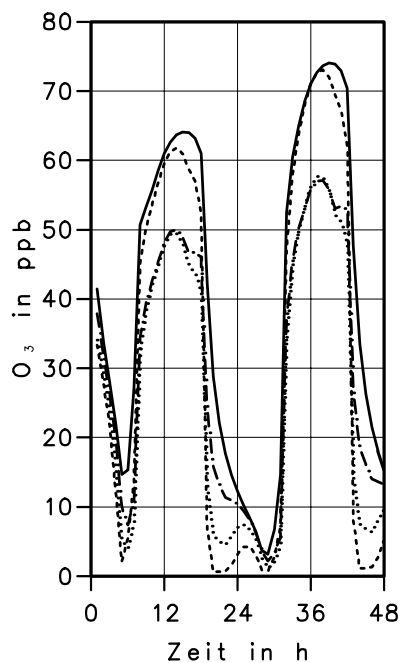
#### 4.2.2 Tagesgänge

Abbildung 4.6 zeigt berechnete Tagesgänge der Konzentrationen der Substanzen  $\text{NO}_2$ , NO,  $\text{O}_3$  und CO in 3 m über Grund. Um die Entwicklung des Konzentrationsfeldes von Tag zu Tag erkennen zu können, wurden jeweils 48 Stunden dargestellt. Bei CO wurde als Startwert die typische nordhemisphärische Hintergrundkonzentration von 100 ppb vorgegeben. Die Werte für  $x = -100$  m geben die Konzentration am Einströmrand im Luv wieder, die Autobahn liegt bei  $x = 0$  m. Im Luv zeigt der zeitliche Konzentrationsverlauf mittleres bodennahes Verhalten, das von Emissionen einerseits und der zeitlichen Entwicklung der Grenzschichthöhe andererseits geprägt ist. Während der stabilen thermischen Schichtung wächst die Konzentration insbesondere während Zeiten mit starken Emissionen deutlich an. Mit Beginn der konvektiven Grenzschichtentwicklung am Vormittag folgt ein signifikanter Rückgang der Konzentration, der erneut von einem deutlichen Anstieg in der stabilen Grenzschicht am Abend abgelöst wird. Im Lee treten erwartungsgemäß durchweg höhere Konzentrationen von CO auf, da es auf der Autobahn emittiert wird. Die Konzentrationen gehen mit zunehmender Entfernung zurück, verbleiben jedoch über dem Wert im Luv. Die höchsten Konzentrationen werden im morgendlichen Berufsverkehr bei noch stabiler thermischer Schichtung erreicht. Der abendliche Berufsverkehr wird in der Zeitreihe kaum sichtbar, das abendliche Ansteigen ist auf die viel geringere Höhe der stabilen Grenzschicht zurückzuführen. Ein qualitativ ähnliches Verhalten zeigt der zeitliche Verlauf der NO-Konzentration. Die Werte im Luv sind jedoch sehr niedrig im Vergleich zum Lee. In 400 m Entfernung sind die Konzentrationen fast auf das Ausgangsniveau zurückgegangen. Der Rückgang

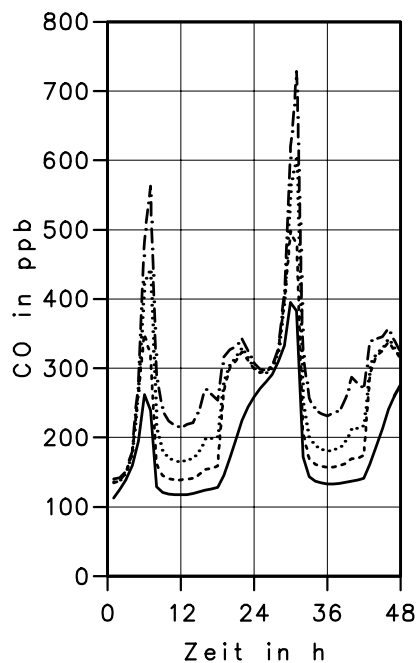
—  $x = -100$  m    - - -  $x = 25$  m    .....  $x = 100$  m    ...  $x = 400$  m

a)  $\text{NO}_2$ 

b) NO

c)  $\text{O}_3$ 

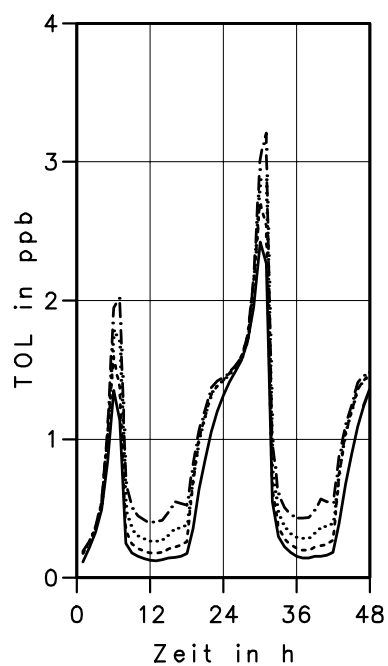
d) CO



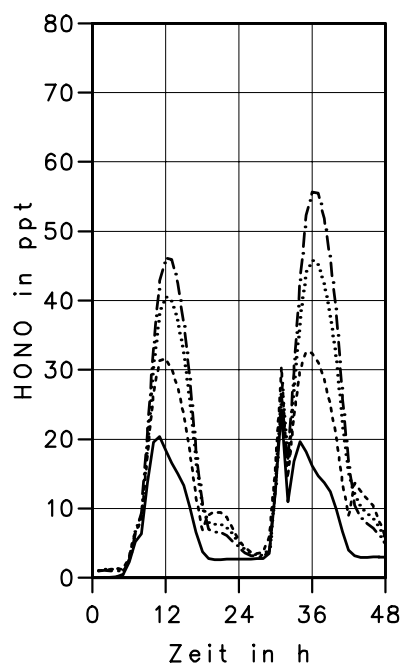
**Abbildung 4.6:** Berechnete Tagesgänge der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn in einer Höhe von 3 m über Grund.

—  $x = -100$  m    - - -  $x = 25$  m    .....  $x = 100$  m    - · - ·  $x = 400$  m

a) TOL



b) HONO



c) OH

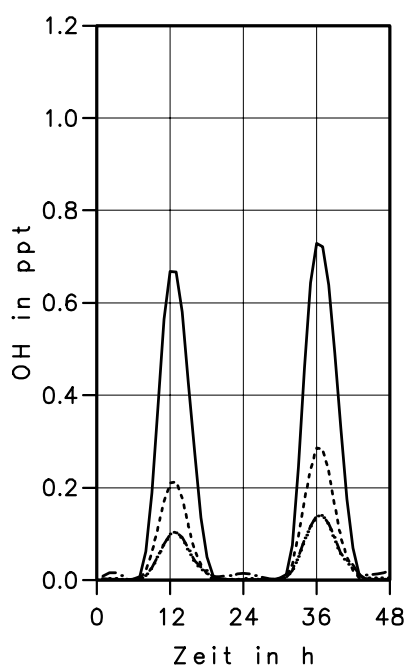
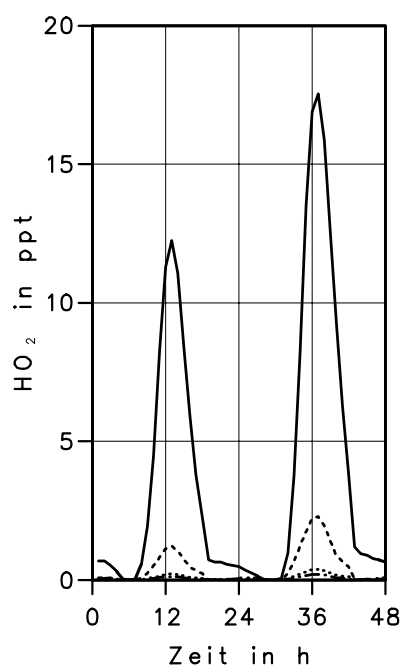
d)  $\text{HO}_2$ 

Abbildung 4.7: Wie Abbildung 4.6.



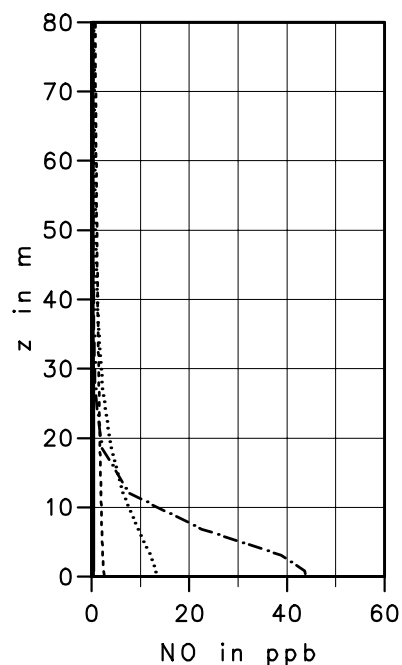
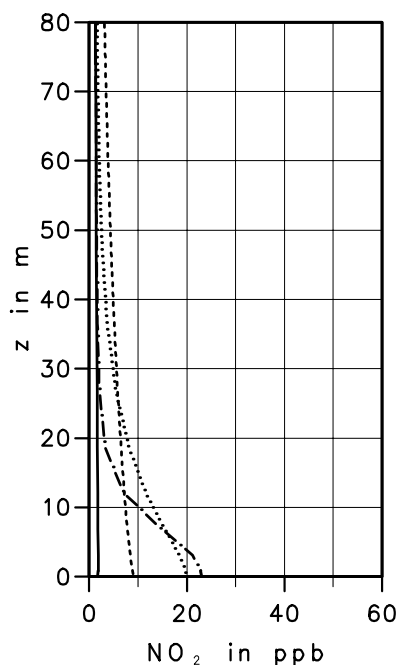
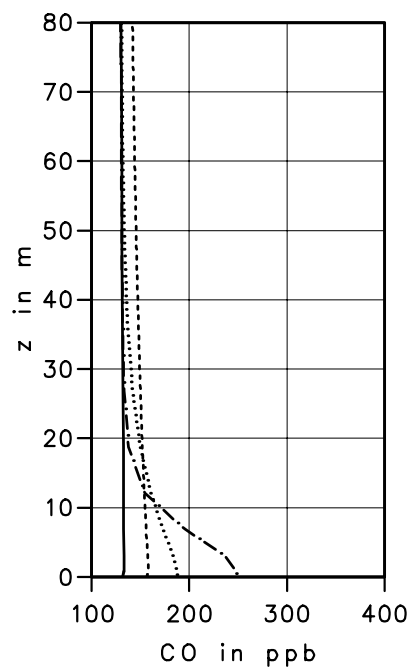
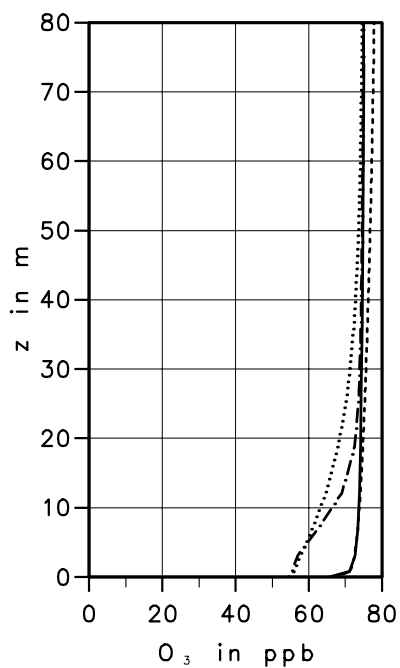
Tagesgang von OH und HO<sub>2</sub> ist sehr eng an die kurzweilige Einstrahlung gebunden und weist daher mittags die höchsten Werte auf. Im Lee erfolgt ein dramatischer Einbruch der Konzentrationen dieser sehr reaktiven Substanzen. In einer Entfernung von 400 m sind die Konzentrationen nur leicht wieder angestiegen.

Abbildung 4.8 zeigt Tagesgänge der Konzentrationen der Substanzen N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> und NO<sub>3</sub> in 3 m über Grund. Diese Substanzen sind in der nächtlichen Atmosphäre im Luv sehr stark vertreten. NO<sub>3</sub> wird tagsüber aufgrund seiner Photolyse schnell abgebaut und infolgedessen wird am Tage kaum N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> gebildet. Im Lee der Autobahn gehen ihre Konzentrationen ebenfalls sehr schnell zurück. NO<sub>3</sub> reagiert u.a. mit NO und mit NO<sub>2</sub>, die beide im Lee in hohen Konzentrationen vorkommen. Infolgedessen fehlt NO<sub>3</sub> als Ausgangssubstanz für N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Die Konzentrationen beider Substanzen bleiben im Lee gegenüber dem Luv in allen Quellentfernungen stark erniedrigt.

### 4.2.3 Vertikalprofile und Fahnenhöhen

Im Folgenden werden die simulierten Vertikalprofile für den zweiten Simulationstag dargestellt (siehe Tagesgänge Abb. 4.6-4.8). Der zweite Tag wurde gewählt, da dann die am ersten Simulationstag auftretenden Einschwingvorgänge abgeklungen sind. Um 13 Uhr, bei stark labiler thermischer Schichtung, weisen die in der Abbildung 4.9 dargestellten Vertikalprofile der Substanzen NO<sub>2</sub>, NO, O<sub>3</sub> und CO eine ausgeprägte Entfernungsabhängigkeit auf. Am Beispiel des chemisch vernachlässigbar langsam reagierenden CO lässt sich die Wirkung von Advektion und Diffusion auf die Gestalt des Vertikalprofils erkennen. Im Luv ( $x = -100$  m) zeigt das Profil eine sehr gute vertikale Durchmischung infolge der starken turbulenten Diffusion in der konvektiven Grenzschicht bei nur geringer Deposition. Bei  $x = 25$  m sind die Emissionen der Fahrzeuge bereits auf eine Fahnenhöhe von über 25 m verteilt. Diese wächst mit zunehmender Entfernung weiter an und erreicht bei  $x = 100$  m über 50 m bei zurückgehenden Konzentrationsmaxima in Bodennähe. Am Ausströmrand des Modellgebiets bei  $x = 400$  m übersteigt die Fahne bereits deutlich den dargestellten Höhenbereich von 80 m, wobei die bodennahe Konzentrationszunahme gegenüber dem Lee geringer ist als die Anströmkonzentration. Das Emissionsverhältnis von NO zu NO<sub>2</sub> beträgt 9:1, was sich jedoch nicht in den Vertikalprofilen im Lee widerspiegelt, da die chemische Umwandlung von NO in NO<sub>2</sub> bei gleichzeitigem Ozonabbau eine wichtige Rolle spielt. Die NO-Konzentration geht infolgedessen mit zunehmender Entfernung von der Autobahn deutlich schneller als die CO-Konzentration zurück, während sich die NO<sub>2</sub>-Konzentration sehr viel langsamer verringert und quellnah sogar anfangs zunimmt. In 400 m Entfernung ist deutlich

—  $x = -100$  m    - -  $x = 25$  m    .....  $x = 100$  m    ...  $x = 400$  m

a)  $\text{NO}_2$ b)  $\text{NO}$ c)  $\text{O}_3$ d)  $\text{CO}$ 

**Abbildung 4.9:** Berechnete Vertikalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn bei stark labiler Schichtung um 13 Uhr.



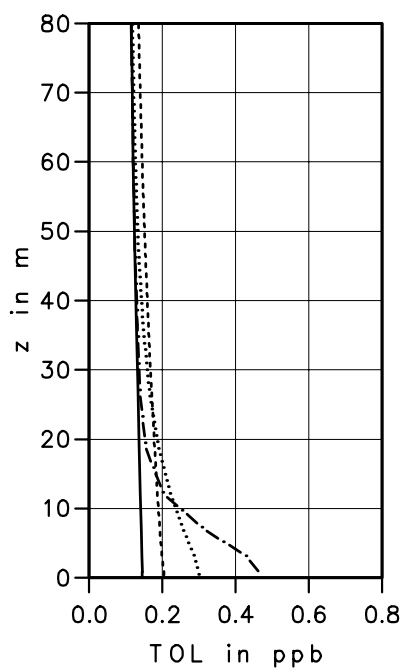
mehr  $\text{NO}_2$  in der Abgasfahne als  $\text{NO}$ . Die Umwandlung von  $\text{NO}$  in  $\text{NO}_2$  spiegelt sich in einem Ozondefizit im Lee gegenüber dem Luv wider. Das Profil der Ozonkonzentration weist im Luv infolge der hohen Depositionsgeschwindigkeit von Ozon einen leichten Rückgang zum Erdboden hin auf. Im Lee tritt ein signifikanter Rückgang der Ozonkonzentration auf, der bodennah ca. 10 ppb beträgt. Bei der starken vertikalen Durchmischung in der konvektiven Grenzschicht ist dieser bei  $x = 400$  m wieder verschwunden.

Die Konzentration der emittierten Modells substanz TOL, die im Wesentlichen aus den Substanzen Toluol und Benzol besteht, zeigt um 13 Uhr sehr ähnliche Vertikalprofile wie  $\text{CO}$  (Abb. 4.10). Die HONO-Konzentration weist eine sehr starke Zunahme im Lee auf. Es wird aus dem emittierten  $\text{NO}$  und  $\text{OH}$  gebildet. Die bodennahe Konzentration geht zwar mit zunehmender Quellentfernung etwas zurück, integriert über den kompletten Höhenbereich nimmt die Konzentration von HONO jedoch sehr stark zu. Die Radikale  $\text{OH}$  und  $\text{HO}_2$  zeigen in der Abgasfahne der Autobahn insgesamt einen starken Konzentrationsrückgang infolge einer Vielzahl von Reaktionen mit nahezu allen emittierten Substanzen und deren Folgeprodukten. Am oberen Rand der Abgasfahne, im Bereich einer nur geringen Erhöhung der Konzentration emittierter Substanzen, kann man bei den Vertikalprofilen der  $\text{OH}$ -Konzentration bei  $x = 25$  m und  $x = 100$  m jedoch eine deutliche Zunahme erkennen. In der vertikalen Säule nimmt das Defizit von  $\text{OH}$  mit zunehmender Entfernung dennoch deutlich zu. Die Konzentration von  $\text{HO}_2$  zeigt keine Zunahme im oberen Abgasfahnenbereich, sondern einen noch stärkeren Rückgang mit der Quellentfernung. Bodennah geht die  $\text{HO}_2$ -Konzentration bis auf Null zurück. Es fällt auf, dass insbesondere beim  $\text{HO}_2$  die Fahnenhöhe im Nahbereich höher erscheint als bei direkt emittierten Substanzen ohne schnelle chemische Reaktionen wie TOL oder  $\text{CO}$ . Offensichtlich reichen bei sehr reaktiven Substanzen geringste Konzentrationsänderungen der Reaktionspartner für eine in dieser Art der Darstellung sichtbare Differenz zwischen Luv und Lee aus.

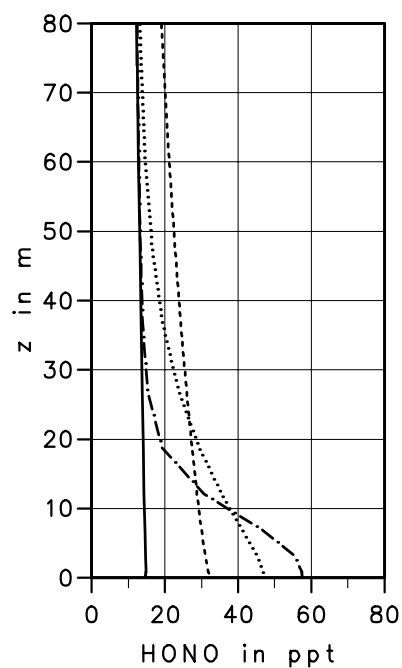
Bei nur leicht labiler thermischer Schichtung um 18 Uhr treten deutlich geringere Fahnenhöhen auf als um 13 Uhr (Abb. 4.11 und 4.12). Bei ungefähr vergleichbaren Emissionen des auf der Autobahn stattfindenden Verkehrs treten bei den direkt emittierten, sehr langsam reagierenden Substanzen  $\text{CO}$  und TOL bodennah mit zunehmender Quellentfernung höhere Maximalkonzentrationen auf im Vergleich zu 13 Uhr. Beide Effekte sind eine Folge der nun schwächeren atmosphärischen Turbulenz und somit geringeren Diffusionskoeffizienten (vgl. Kap. 3.4). In einer Entfernung von  $x = 400$  m beträgt

—  $x = -100$  m    - · -  $x = 25$  m    ····  $x = 100$  m    ---  $x = 400$  m

a) TOL



b) HONO



c) OH

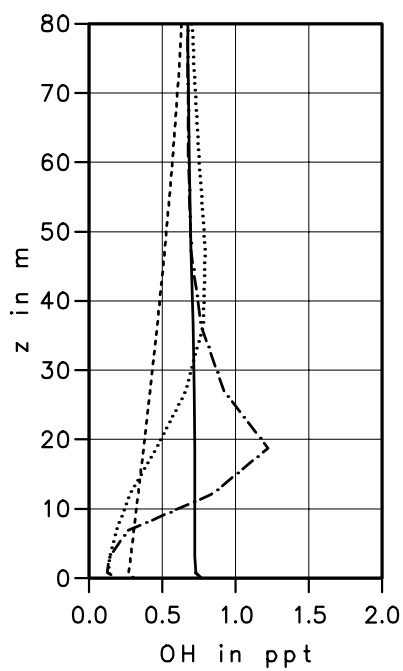
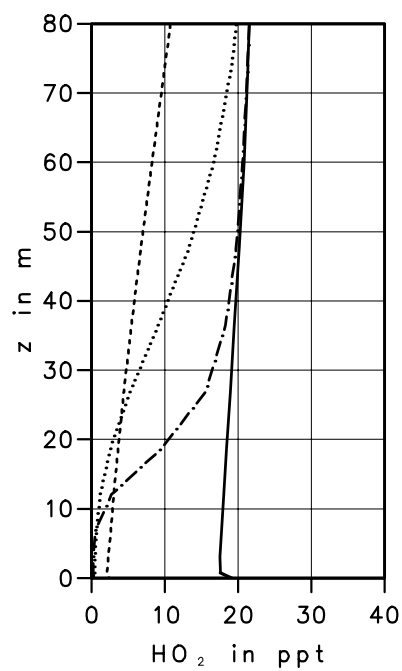
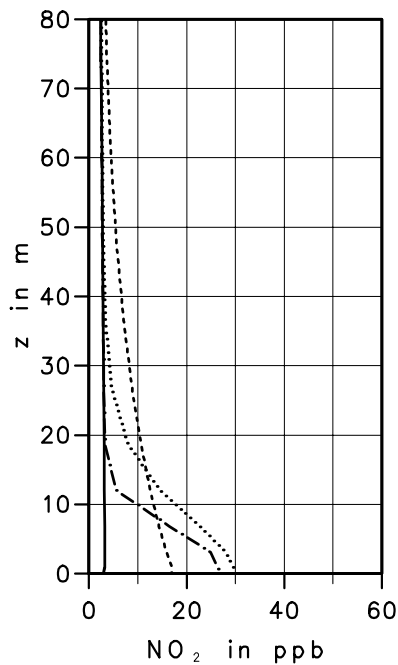
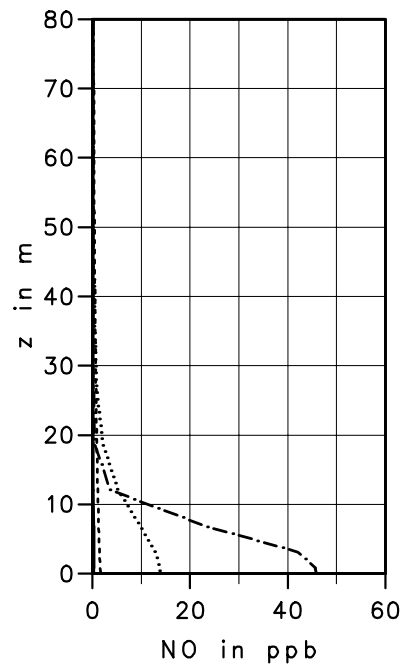
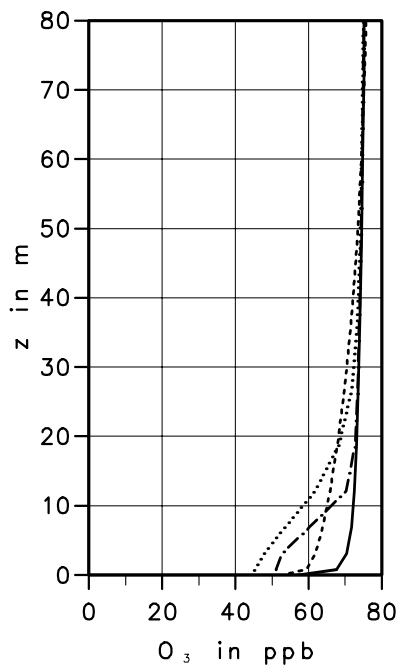
d) HO<sub>2</sub>

Abbildung 4.10: Wie Abbildung 4.9.

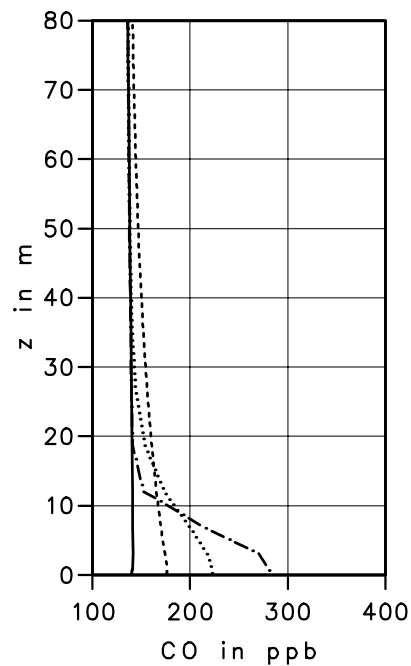
—  $x = -100$  m    - -  $x = 25$  m    .....  $x = 100$  m    ...  $x = 400$  m

a)  $\text{NO}_2$ 

b) NO

c)  $\text{O}_3$ 

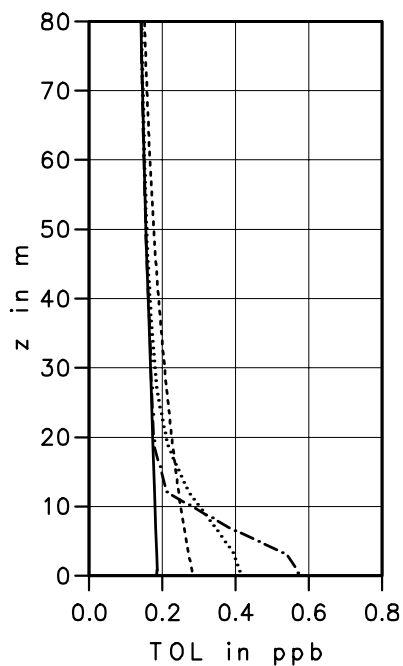
d) CO



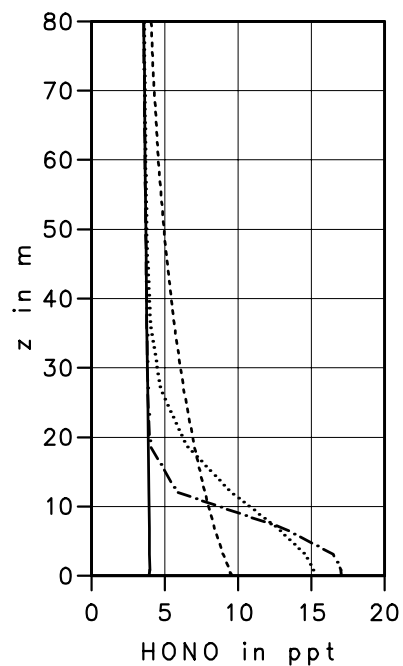
**Abbildung 4.11:** Berechnete Vertikalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr.

—  $x = -100$  m    - · -  $x = 25$  m    ····  $x = 100$  m    ···  $x = 400$  m

a) TOL



b) HONO



c) OH

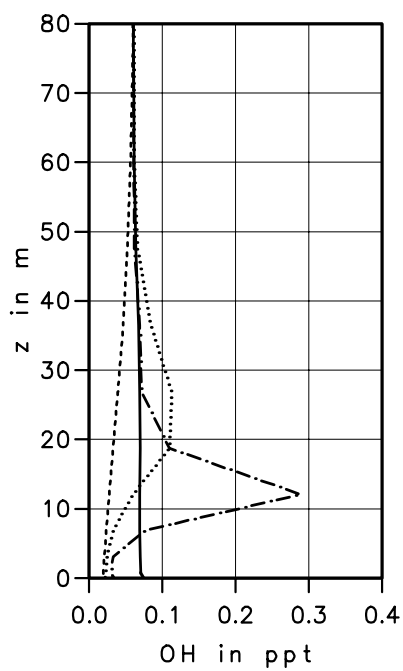
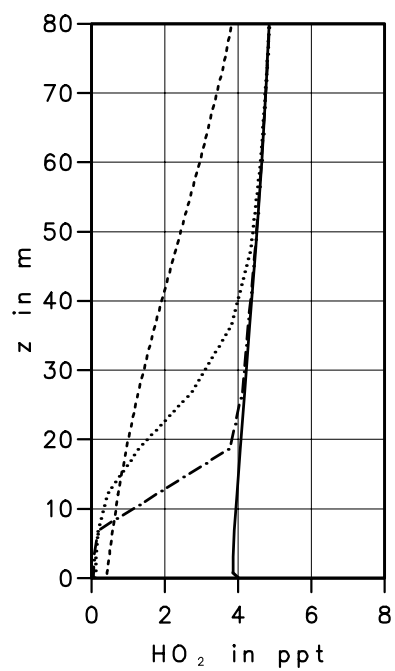
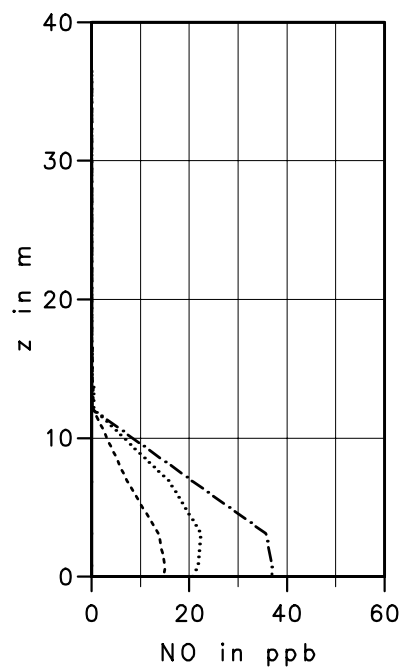
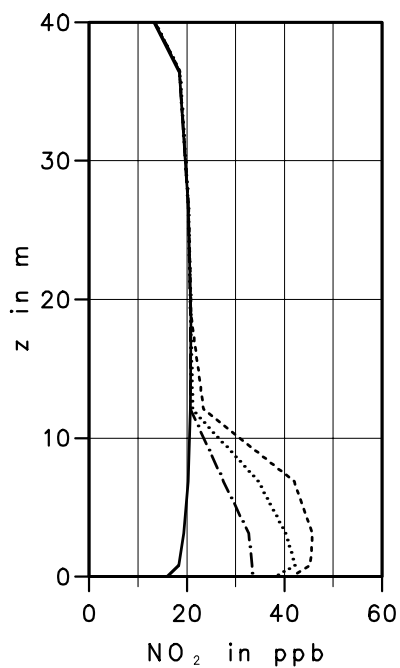
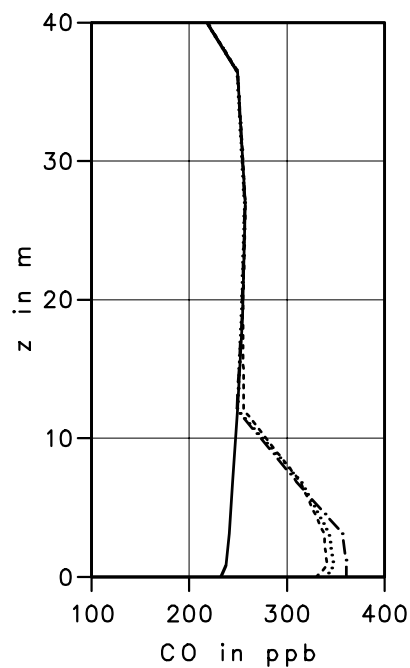
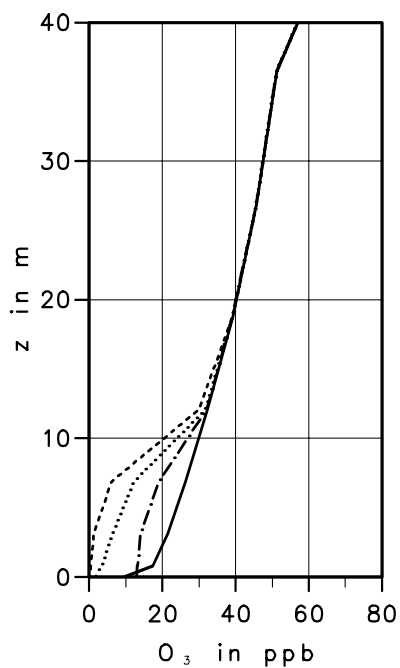
d) HO<sub>2</sub>

Abbildung 4.12: Wie Abbildung 4.11.

die Fahnenhöhe aber immer noch mehr als 80 m. Das maximale Ozondefizit beträgt nun bodennah mehr als 20 ppb und hat sich somit gegenüber 13 Uhr verdoppelt. Die Konzentration von HONO ist sowohl im Luv als auch im Lee der Autobahn etwa auf ein Viertel zurückgegangen. Die Gestalt der Profile blieb dabei abgesehen von der geringeren Fahnenhöhe weitgehend unverändert. Die Zunahme der OH-Konzentration im oberen Bereich der Fahne überwiegt bei  $x = 25$  m und  $x = 100$  m im Gegensatz zu den Verhältnissen um 13 Uhr deutlich den Abbau unmittelbar über dem Erdboden. Erst bei  $x = 400$  m ist vertikal integriert ein deutlicher Rückgang gegenüber der Konzentration im Luv zu erkennen. Insgesamt liegt das Konzentrationsniveau von OH und HO<sub>2</sub> nun um eine Größenordnung niedriger als mittags. Das Aussehen der Vertikalprofile der HO<sub>2</sub>-Konzentration hat sich jedoch nicht geändert.

In der stabilen nächtlichen Grenzschicht um 22 Uhr sind bei einer Grenzschichthöhe von ca. 60 m die Fahnenhöhen weiter zurückgegangen (Abb. 4.13 und 4.14). In den Diagrammen für NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> und CO (Abb. 4.13) liegt sie bei ca. 18 m für  $x = 400$  m. Aufgrund des zusätzlichen chemischen Verlustes erscheint die Abgasfahne anhand der NO-Konzentration etwas niedriger als bei den vorgenannten Substanzen, da im oberen Fahnenbereich das NO bereits vollständig abgebaut zu sein scheint. Durch die starke Turbulenz an der Autobahn infolge des Turbulenzeintrags durch die Fahrzeuge und durch die Dammüberströmung erfolgt quellnah sehr schnell ein Ansteigen der Fahnenhöhe auf ca. 12 m bei  $x = 25$  m. Mit zunehmender Quellentfernung steigt sie im Folgenden nur sehr langsam weiter an, da die Turbulenz in der ungestörten Atmosphäre sehr viel schwächer ist als tagsüber. Daher gehen die bodennahen Konzentrationen von CO nur sehr langsam mit zunehmendem Abstand von der Autobahn zurück. Der Rückgang der NO-Konzentration und der gleichzeitige Anstieg der NO<sub>2</sub>-Konzentration ist überwiegend auf die chemische Umwandlung unter Einbeziehung des Ozons zurückzuführen. Ozon weist im Gegenzug einen kontinuierlichen Rückgang der Konzentration mit der Quellentfernung auf. Während die emittierte Modellsubstanz TOL (Abb. 4.14) einen nur geringen Rückgang mit zunehmender Quellentfernung ähnlich wie CO zeigt, weist HONO das umgekehrte Verhalten mit einem deutlichen Anstieg infolge chemischer Produktion auf. Die dabei bodennah auftretenden HONO-Konzentrationen sind trotz erheblich geringeren Emissionen vergleichbar mit den um 18 Uhr simulierten. Da nachts die Konzentrationen von OH und HO<sub>2</sub> sehr gering und für die nächtliche Chemie von untergeordneter Bedeutung sind, wurden sie in der Abbildung 4.14 gegenüber den vorher dargestellten Zeitpunkten (Abb. 4.10 und 4.12) durch die Substanzen N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> und NO<sub>3</sub> ersetzt. Bei beiden Substanzen fällt ein signifikanter Rückgang auf, der in der

—  $x = -100$  m    - -  $x = 25$  m    .....  $x = 100$  m    ...  $x = 400$  m

a)  $\text{NO}_2$ b)  $\text{NO}$ c)  $\text{O}_3$ d)  $\text{CO}$ 

**Abbildung 4.13:** Berechnete Vertikalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn bei stabiler Schichtung um 22 Uhr.

—  $x = -100$  m    - - -  $x = 25$  m    .....  $x = 100$  m    ...  $x = 400$  m

a) TOL

b) HONO

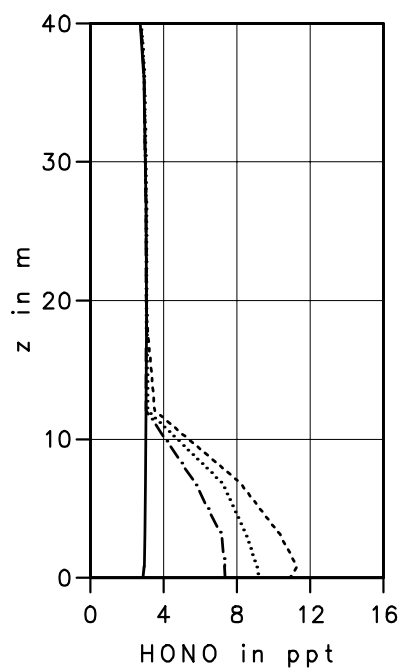
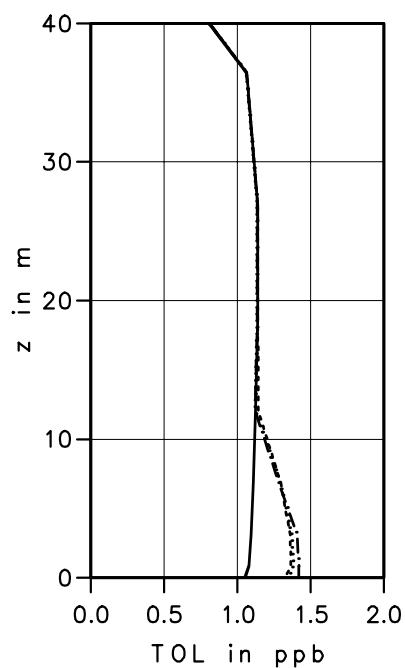
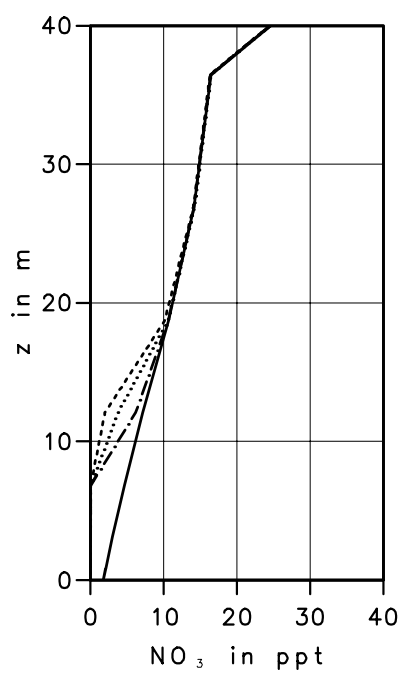
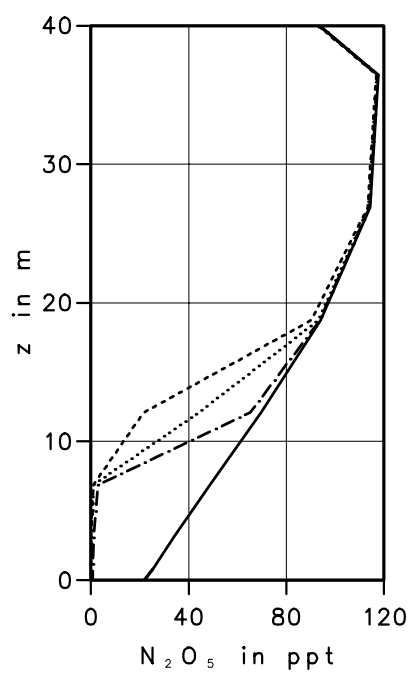
c)  $N_2O_5$ d)  $NO_3$ 

Abbildung 4.14: Wie Abbildung 4.13.

unteren Hälfte der Fahne die Konzentrationen auf Null zurückgehen lässt. Im oberen Fahnenbereich dauert der Rückgang bis in größere Quellentfernungen an, so dass die Vertikalprofile am Ausströmrand sehr stark gegenüber den Profilen im Lee modifiziert sind.

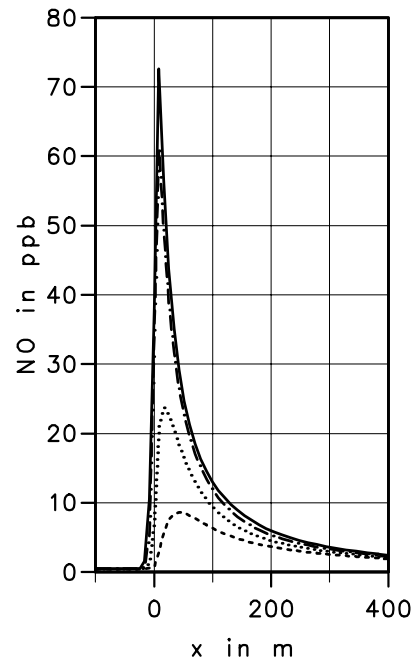
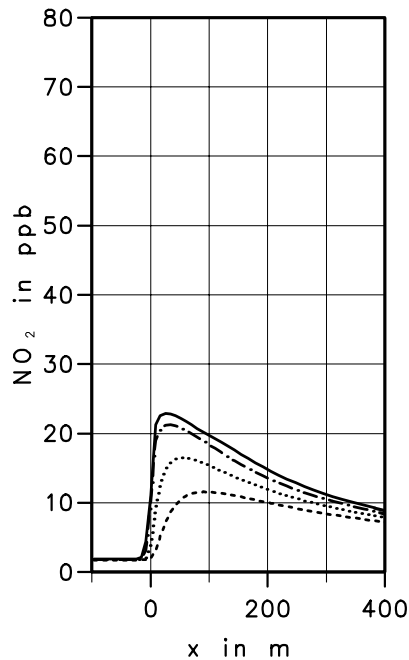
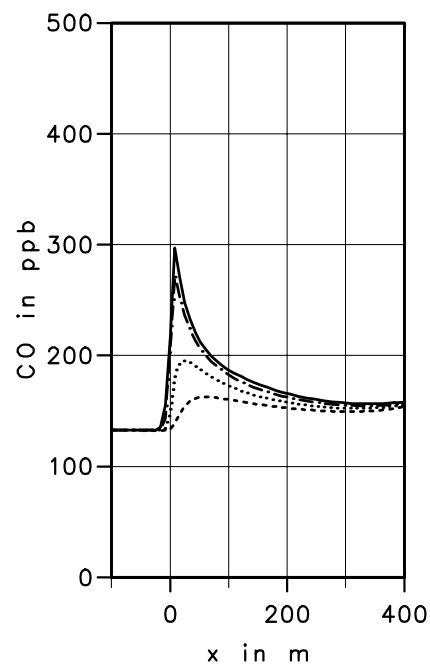
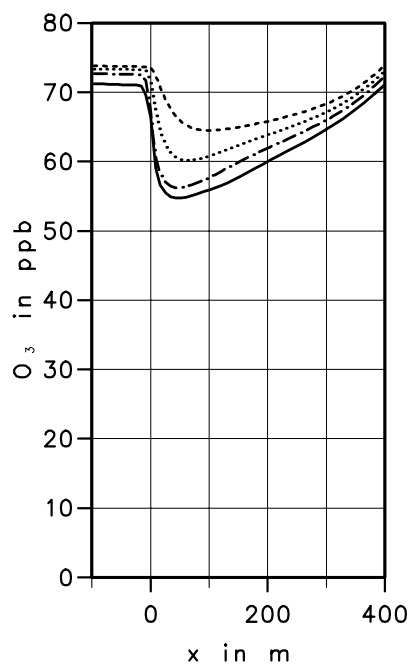
#### 4.2.4 Horizontalprofile und Abklingraten

Das unterschiedliche Abklingverhalten der Konzentration verschiedener Substanzen wird insbesondere durch Horizontalprofile der Konzentration senkrecht zur Autobahn ersichtlich. Abbildung 4.15 zeigt diese für die Substanzen  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{O}_3$  und  $\text{CO}$  bei stark labiler Schichtung um 13 Uhr. Die Mitte der Autobahn liegt bei  $x = 0$  m. Der Scharparameter ist dabei die Höhe über Grund. Es sind Horizontalprofile der Konzentration auf den vier untersten Rechenflächen über Grund dargestellt, die eine Höhe von 0,8 m, 3,1 m, 6,9 m und 12,1 m aufweisen. Den Referenzfall einer auf der Autobahn emittierten Substanz mit vernachlässigbarer chemischer Umwandlung stellt  $\text{CO}$  dar. Sein Abklingen mit zunehmender Entfernung wird nahezu ausschließlich durch den Transport, Advektion und Diffusion, gesteuert. Das Signal der Autobahn wird mit zunehmender Höhe schwächer, was aufgrund der Neigung der Vertikalprofile zu erwarten war. Im Vergleich zur  $\text{CO}$ -Konzentration geht die  $\text{NO}$ -Konzentration mit zunehmender Entfernung von der Autobahn im Lee viel schneller zurück. Dies ist eine Folge des zusätzlich zum Transport auftretenden chemischen Verlustes. Umgekehrtes Verhalten ist bei  $\text{NO}_2$  zu beobachten. Hier verläuft der Konzentrationsrückgang im Lee infolge der vertikalen Durchmischung sehr viel langsamer als bei  $\text{CO}$  oder  $\text{NO}$ , da  $\text{NO}_2$  im Lee chemisch produziert wird. Ein geradezu spiegelbildliches Verhalten im Vergleich zu  $\text{NO}_2$  findet man beim Ozon. Das Ozondefizit im Lee der Autobahn erklärt weitgehend das Horizontalprofil von  $\text{NO}_2$ , da dieses nur in geringem Maße emittiert wird.

Abbildung 4.16 zeigt die Horizontalprofile der Konzentrationen der Substanzen  $\text{TOL}$ ,  $\text{HONO}$ ,  $\text{OH}$  und  $\text{HO}_2$  um 13 Uhr. Während beim  $\text{TOL}$  wie beim  $\text{CO}$  nur der Transport relevant ist, führt chemische Produktion beim  $\text{HONO}$  zu einem wesentlich geringeren bodennahen Abklingen im Lee der Autobahn. Beim Hydroxylradikal  $\text{OH}$  tritt unmittelbar vor der Autobahn ein signifikantes lokales Maximum auf. Dies ist auf die sehr geringe Diffusion stromauf von emittierten Substanzen und deren Folgeprodukten zurückzuführen. Durch die leichte Erhöhung der Konzentration diverser Substanzen kann die  $\text{OH}$ -Konzentration bereits deutlich verändert werden, da es sehr schnell mit nahezu allen Substanzen chemisch wechselwirkt. Ab der Autobahn selbst bei dann sehr ho-



—  $z=0.8$  m    - - -  $z=3.1$  m    .....  $z=6.9$  m    ---  $z=12.1$  m

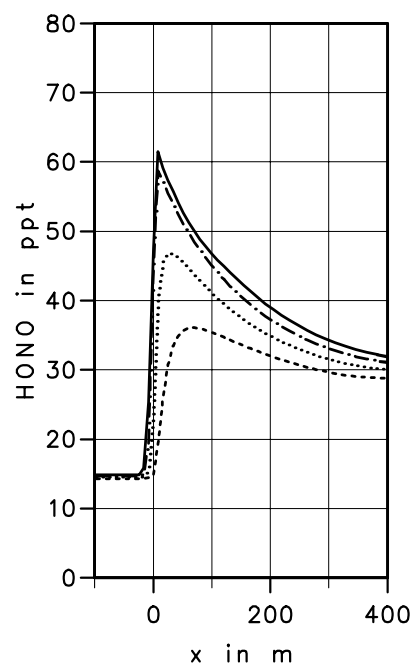
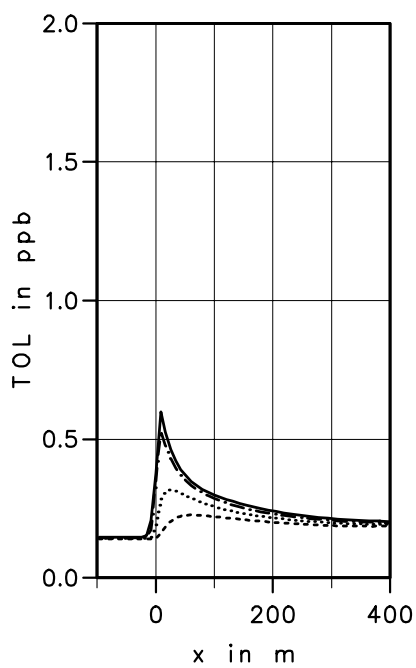
a)  $\text{NO}_2$ b)  $\text{NO}$ c)  $\text{O}_3$ d)  $\text{CO}$ 

**Abbildung 4.15:** Berechnete Horizontalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Höhen über Grund bei stark labiler Schichtung um 13 Uhr.

—  $z=0.8$  m- -  $z=3.1$  m...  $z=6.9$  m---  $z=12.1$  m

a) TOL

b) HONO



c) OH

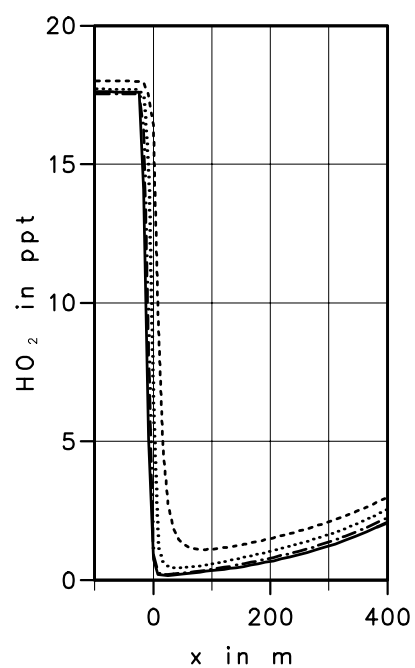
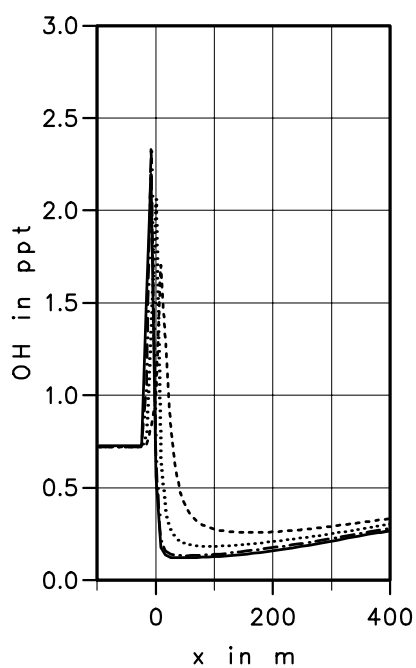
d)  $\text{HO}_2$ 

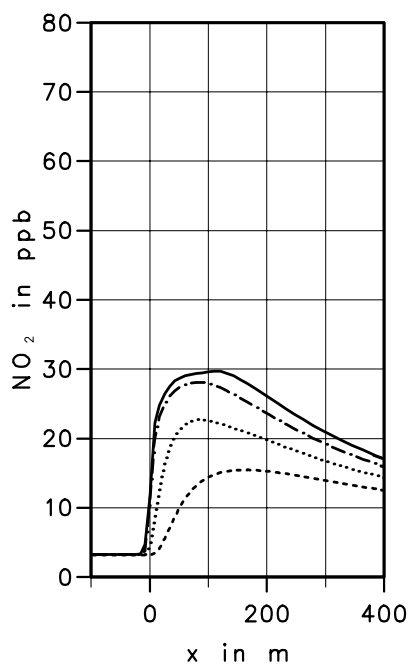
Abbildung 4.16: Wie Abbildung 4.15.

hen Konzentrationen anderer Substanzen überwiegen jedoch deutlich die abbauenden Reaktionen. Die Folge ist ein deutlicher Rückgang der bodennahen Konzentrationen im nahen Lee der Autobahn und eine nur langsame Erholung der OH-Konzentration mit zunehmender Quellentfernung. Einen noch stärkeren Konzentrationsrückgang in geringer Quellentfernung im Lee zeigt  $\text{HO}_2$ , dessen Konzentration im Lee ebenfalls nur sehr langsam wieder ansteigt.

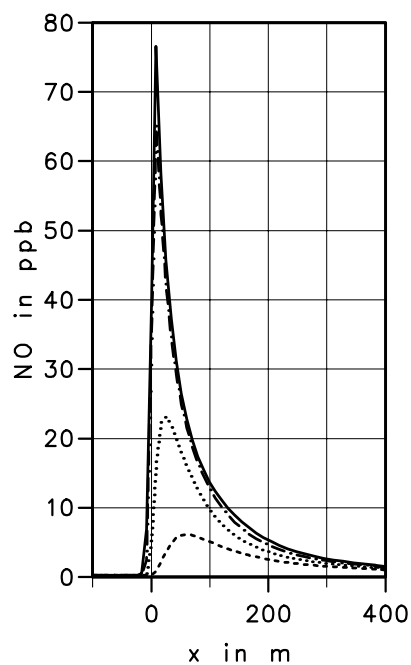
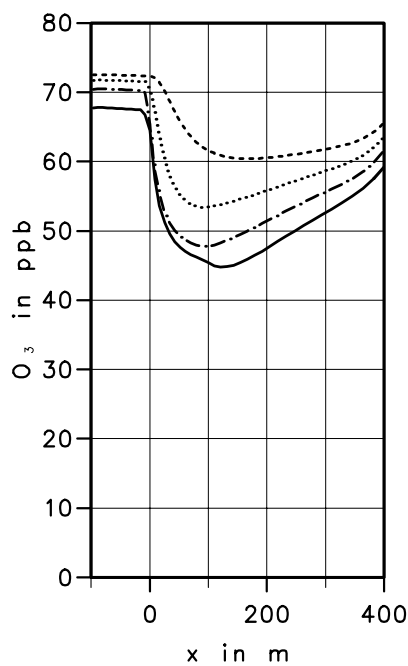
Die Horizontalprofile der Konzentrationen bei nur noch leicht labiler Schichtung um 18 Uhr sind in den Abbildungen 4.17 und 4.18 dargestellt. Aufgrund der geringeren Fahnenhöhen sind die bodennahen Maxima der  $\text{NO}_2$ -Konzentration größer als um 13 Uhr. Ebenso ist das bodennahe Ozondefizit nun stärker ausgefallen. Der Rückgang der bodennahen CO-Konzentration mit zunehmender Quellentfernung erfolgt langsamer als um 13 Uhr. Die Zunahme der HONO-Konzentration (Abb. 4.18) beim Überströmen der Autobahn fällt nun deutlich geringer aus. Die oben geschilderte Struktur des horizontalen OH-Konzentrationsprofils bleibt auf deutlich niedrigerem Niveau erhalten. Ebenso tritt immer noch ein starker Einbruch der  $\text{HO}_2$ -Konzentration an der Autobahn auf jetzt niedrigerem Niveau auf, der auch noch bei  $x = 400$  m klar zu erkennen ist.

Um 22 Uhr bei stabiler thermischer Schichtung (Abb. 4.19) gehen die horizontalen Konzentrationsgradienten allgemein gegenüber den zuvor gezeigten bei labiler Schichtung zurück. Beim  $\text{NO}_2$  ist nun sogar eine stetige Zunahme der Konzentration mit der Entfernung von der Autobahn festzustellen. Offensichtlich überwiegt die chemische Produktion bodennah den Verlust durch die turbulente Diffusion, die nur sehr langsam für eine stärkere vertikale Durchmischung sorgt. In 12 m Höhe wird nur eine schwache Konzentrationszunahme simuliert. Anhand des Verlaufs der CO-Konzentration erkennt man leicht die relativ starke vertikale Durchmischung in Nähe der Autobahn und die wesentlich geringere vertikale Diffusion bei größerer Quellentfernung. Die NO-Konzentration zeigt quellnah einen noch stärkeren Rückgang infolge zusätzlichen chemischen Abbaus, in größeren Quellentfernungen nach Abklingen der autobahninduzierten Turbulenz verläuft der Rückgang auch beim NO deutlich langsamer, aber aufgrund der Chemie stets schneller als beim CO. Die Ozonkonzentration geht durch das Überströmen der Autobahn am Boden von ca. 20 ppb auf nahezu Null zurück und erholt sich im Modellgebiet nicht mehr. Die horizontalen Konzentrationsprofile der Modellsubstanz TOL (Abb. 4.20) zeigen wiederum das gleiche vom Transport vollständig dominierte Abklingverhalten wie beim CO. HONO nimmt im Lee der Autobahn stetig zu, die chemische Produktion überwiegt den bodennahen Verlust infolge vertikaler turbulenter Diffusion.  $\text{N}_2\text{O}_5$  und  $\text{NO}_3$  zeigen am Boden im Lee sehr starke Einbrüche der Konzentrationen. Die Konzentrationen gehen auf Null zurück und steigen im gesam-

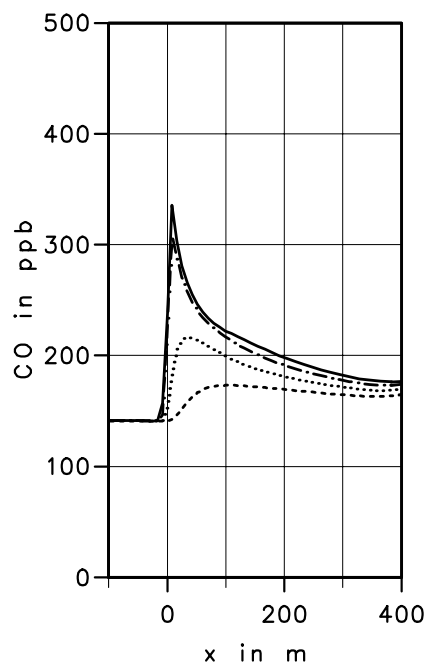
—  $z=0.8$  m    - - -  $z=3.1$  m    .....  $z=6.9$  m    ...  $z=12.1$  m

a)  $\text{NO}_2$ 

b) NO

c)  $\text{O}_3$ 

d) CO

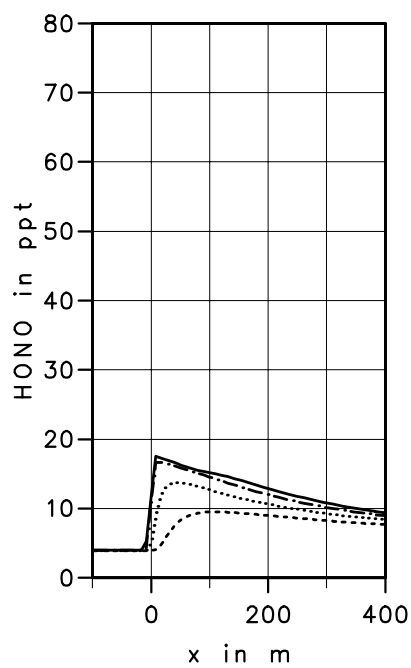
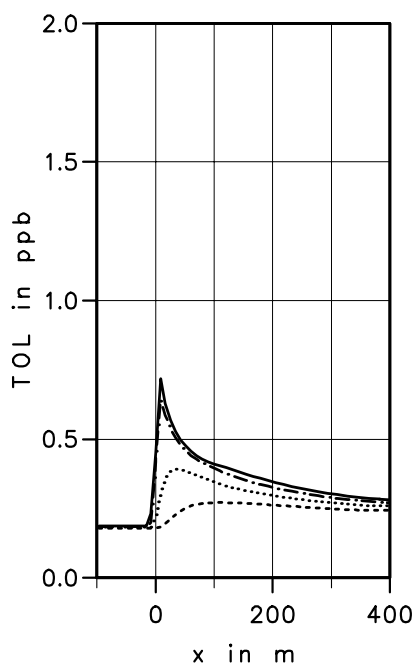


**Abbildung 4.17:** Berechnete Horizontalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Höhen über Grund bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr.

—  $z=0.8$  m    - - -  $z=3.1$  m    .....  $z=6.9$  m    ...  $z=12.1$  m

a) TOL

b) HONO



c) OH

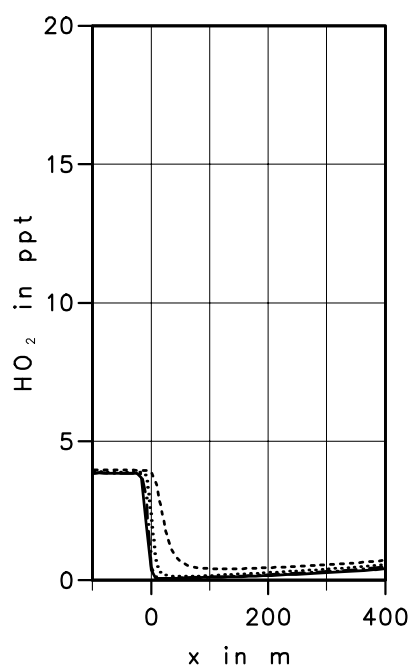
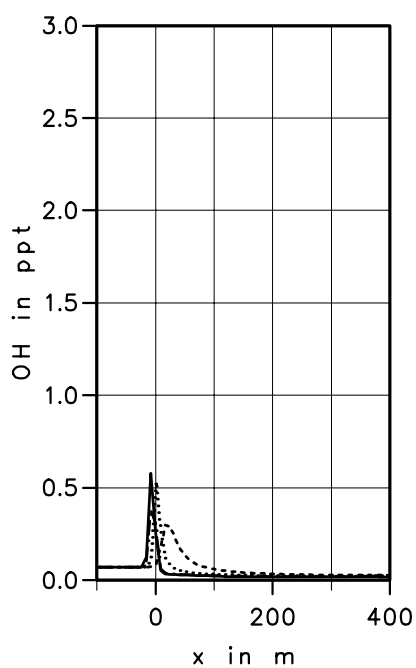
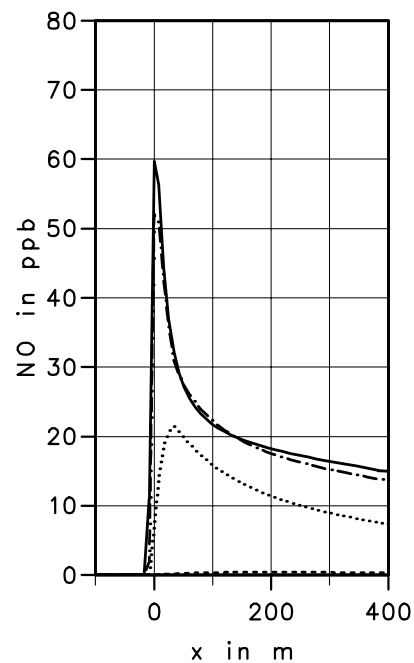
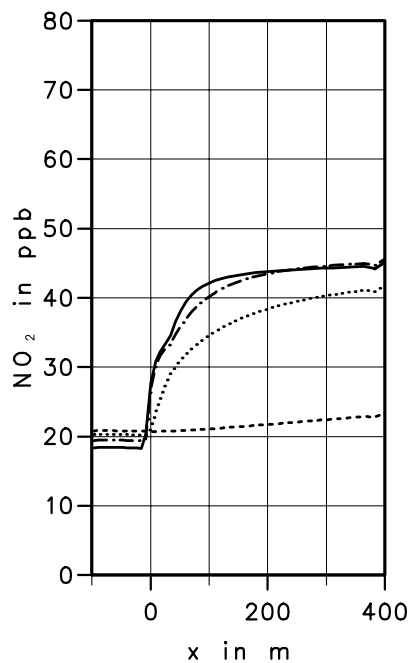
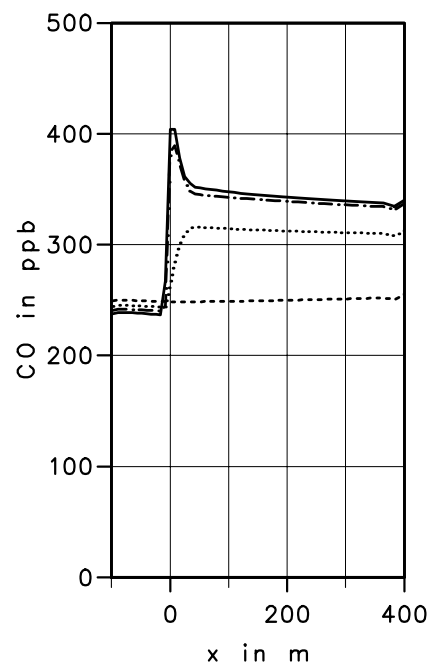
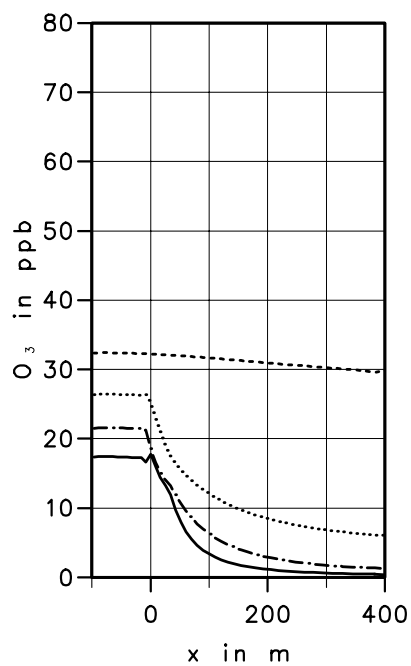
d)  $\text{HO}_2$ 

Abbildung 4.18: Wie Abbildung 4.17.

ten Leebereich nicht mehr nennenswert an. In 12 m Höhe, in die quellnah nur ein sehr kleiner Teil der Emissionen transportiert wird, reagiert die Konzentration ebenfalls mit einem deutlichen Rückgang.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die emittierten und vom Transport dominierten Substanzen wie z.B. CO oder TOL eine Erhöhung der Konzentration an der Autobahn und ein Abklingen mit zunehmender Entfernung von der Autobahn zeigen. Die Fahnenhöhe nimmt allgemein mit zunehmender Entfernung von der Autobahn zu und ist bei labiler thermischer Schichtung deutlich größer als bei stabiler. Das Abklingverhalten von emittierten Substanzen, die an chemischen Reaktionen mit hoher Reaktionsgeschwindigkeit teilnehmen, wird signifikant modifiziert durch die Chemie. So zeigt die NO-Konzentration ein deutlich schnelleres Abklingen im Lee als CO, während die NO<sub>2</sub>-Konzentration ein signifikant langsames Abklingen im Vergleich zu CO, bei stabiler Schichtung sogar eine stetige Zunahme aufweist. HONO wird nicht emittiert, im Lee aber sehr schnell chemisch produziert und zeigt bodennah ein nur geringes Abklingen, in der vertikalen Säule jedoch ein Ansteigen der Konzentration. Bei stabiler Schichtung tritt bei HONO auch bodennah eine Zunahme mit wachsender Entfernung von der Autobahn auf. Eine Reihe von Substanzen, die in der anströmenden Luftmasse vorhanden sind und auf der Autobahn nicht emittiert werden, weisen im Bereich der Autobahn einen mehr oder minder starken Rückgang der Konzentration auf. Eine dieser Substanzen ist Ozon, das infolge der chemischen Umwandlung von NO in NO<sub>2</sub> abgebaut wird. Starke Einbrüche zeigen die Konzentrationen der Radikale OH und HO<sub>2</sub> tagsüber sowie N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> und NO<sub>3</sub> in der nächtlichen Grenzschicht. Es sind somit nicht nur die Konzentrationsfelder von emittierten Substanzen, in denen die Autobahn sichtbar wird, sondern auch die Konzentrationsverteilungen nicht emittierter Substanzen.

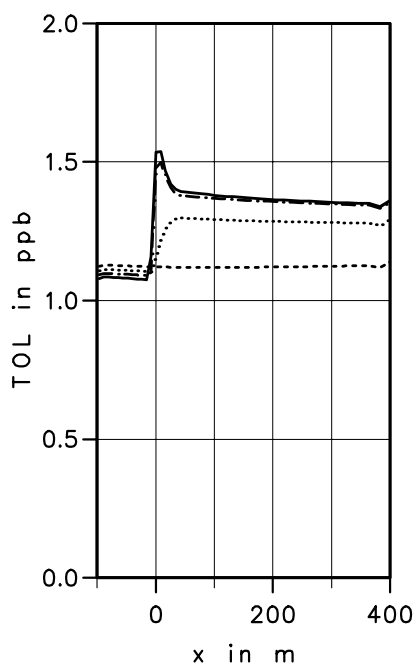
—  $z=0.8$  m    - -  $z=3.1$  m    .....  $z=6.9$  m    ---  $z=12.1$  m

a)  $\text{NO}_2$ b)  $\text{NO}$ c)  $\text{O}_3$ d)  $\text{CO}$ 

**Abbildung 4.19:** Berechnete Horizontalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Höhen über Grund bei stabiler Schichtung um 22 Uhr.

—  $z=0.8$  m    - - -  $z=3.1$  m    .....  $z=6.9$  m    ...  $z=12.1$  m

a) TOL



b) HONO

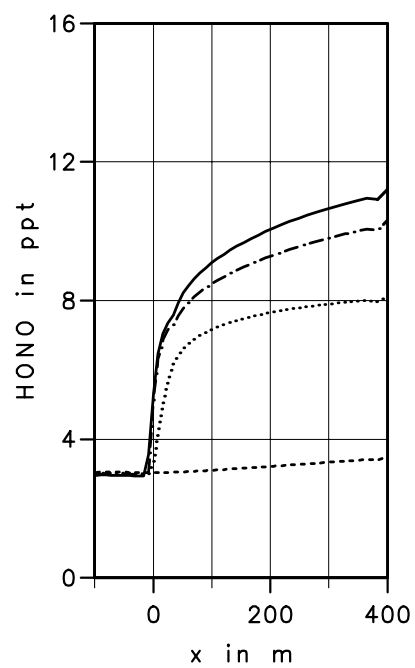
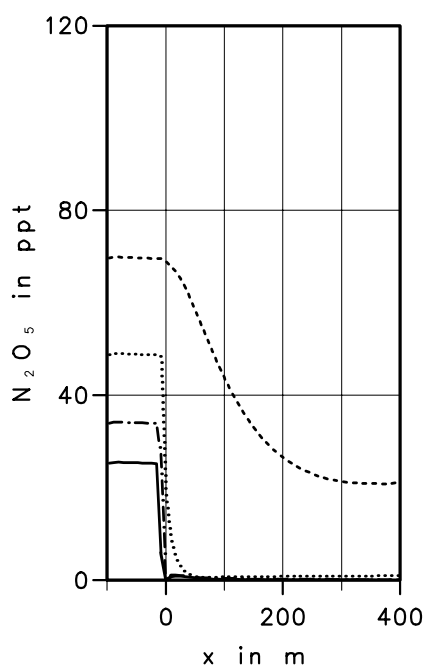
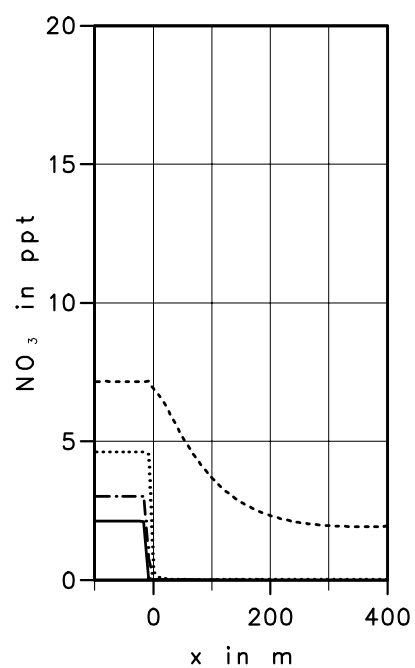
c)  $N_2O_5$ d)  $NO_3$ 

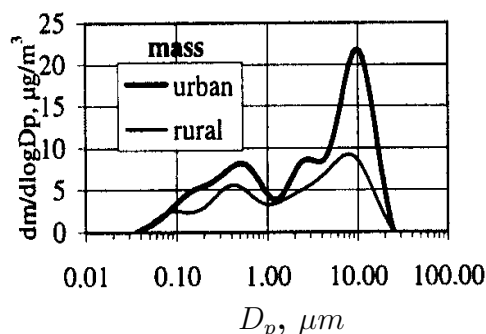
Abbildung 4.20: Wie Abbildung 4.19.



# 5 Berechnete Konzentrationsverteilungen des verkehrsbedingten Grobstaubs

## 5.1 Die Bedeutung des verkehrsbedingten Grobstaubs

Die partikelförmigen Luftbeimengungen, das sog. Aerosol, sind ein wichtiger Bestandteil der Zusammensetzung der Atmosphäre. Das Aerosol modifiziert eine Vielzahl von atmosphärischen Prozessen. Partikel wirken als Kondensationskeime und haben daher einen großen Einfluss auf die Ausbildung von Niederschlagsprozessen und den Wasserkreislauf. An Partikeln läuft heterogene Chemie ab, die die Gasphasenchemie in ihrer Wirkung auf die Konzentrationen beträchtlich modifizieren kann. Das Aerosol beeinflusst den Strahlungshaushalt der Atmosphäre und wirkt so auf die Sichtweite und das Klima. Partikel können das elektrische Feld verändern und auf vielfältige Weise mit der Biosphäre wechselwirken. Eine ausführlichere Übersicht über atmosphärische Prozesse, an denen Partikel beteiligt sind, und die Wirkungen des Aerosols findet man bei Riemer (2002). Aus epidemiologischen Studien der jüngsten Vergangenheit weiß man, dass Aerosolpartikel sowohl für akute als auch für langfristige negative Effekte auf die Gesundheit des Menschen verantwortlich gemacht werden können. Eine ausführliche Zusammenstellung epidemiologischer Studien findet man bei BUWAL (2001). Die Europäische Kommission hat daher bereits eine Richtlinie (1999/30 EG) erlassen. Die dort genannten Grenzwerte für die Massenkonzentrationen für PM<sub>10</sub>, d.h. aller Partikel mit einem Durchmesser von bis zu 10 µm, von Tagesmittelwerten von 50 µg m<sup>-3</sup> ab 2005 bzw. 40 µg m<sup>-3</sup> ab 2010 und Jahresmittelwerten von 40 µg m<sup>-3</sup> (2005) bzw. 20 µg m<sup>-3</sup> (2010) werden derzeit in den meisten Ländern der EU immer wieder überschritten. Auch in Deutschland wird es kaum möglich sein, die dort genannten Grenzwerte überall und dauerhaft einzuhalten. Für eine erfolgreiche langfristige Verringerung der Immissionskonzentrationen bedarf es zunächst einer genauen Quellzuordnung der momentan gemessenen Partikelverteilungen. Hierbei kann die Ausbreitungsrechnung ein



**Abbildung 5.1:** Mittlere gemessene Größenverteilungen der Massendichte  $m$  des städtischen und ländlichen Aerosols als Funktion des Partikeldurchmessers  $D_P$  nach Pakkanen et al. (2001).

wichtiges Hilfsmittel sein, da sie auf der Basis als bekannt vorausgesetzter Emissionen Konzentrationsverteilungen simulieren kann.

Ein als charakteristisch anzusehendes Beispiel für mittlere gemessene Größenverteilungen der Massendichte des städtischen und ländlichen Aerosols zeigt Abbildung 5.1 (Pakkanen et al. 2001). Die Messwerte wurden von den Autoren in Helsinki und ca. 50 km nordwestlich davon gewonnen. Sehr ähnliche Größenverteilungen für städtische und ländliche Messorte findet man ebenfalls bei anderen Autoren wie z.B. Seinfeld und Pandis (1998) oder Salma et al. (2002). Die Verteilungen zeichnen sich durch zwei sog. Moden aus, den Akkumulationsmode und den Mode der groben Partikel. Unter bestimmten Bedingungen kann ein weiterer Mode mit einem Maximum bei Durchmessern von ca. 10 nm auftreten, der die Nukleation beschreibt. Das Auftreten des Akkumulationsmodes ist im wesentlichen auf koagulierte Partikel mit ursprünglich kleineren Durchmessern und im städtischen Bereich auf direkt emittierte Partikel aus Verbrennungsprozessen wie z.B. Ruß zurückzuführen. Der grobe Mode enthält neben Salzpartikeln an maritimen Standorten mineralische Partikel und anthropogene Partikel. Die Differenz zwischen den beiden Kurven in Abbildung 5.1 kann als überwiegend anthropogen verursachter Anteil am städtischen Aerosol interpretiert werden. Dabei fällt auf, dass ein Großteil des Zuwachses im groben Mode stattfindet. Während Emissionen aus Verbrennungsprozessen die Zunahme der Massendichte bei Durchmessern kleiner als 1  $\mu\text{m}$  bewirken, sind es bei größeren Partikeln andere Mechanismen, die zu großen Emissionen führen. Insbesondere die Abrieb- und Aufwirbelungspartikel aus dem Straßenverkehr sind dafür verantwortlich.

## 5.2 Der Straßenverkehr als Quelle für Grobstaub

Grobstaub kann durch unterschiedliche physikalische Mechanismen durch Kraftfahrzeuge in die Atmosphäre emittiert werden. Zum einen gibt es Abriebprozesse, die am Fahrzeug selbst angreifen, wie Reifenabrieb oder Bremsenabrieb. Ebenso wird an der Fahrbahnoberfläche infolge der Einwirkung von Tangentialkräften Fahrbahnabrieb erzeugt. Die Aufwirbelung von auf der Fahrbahn aufliegendem Staub durch fahrzeuginduzierte Turbulenz wird mit Resuspension bezeichnet.

### 5.2.1 Reifenabrieb

An der Grenzfläche zwischen Reifen und Fahrbahnoberfläche wirken Reibungskräfte. So können Antriebs-, Brems- und Seitenführungskräfte übertragen werden. Auch die Verformung des Reifengummis durch Fahrbahnunebenheiten erzeugt Reibungskräfte im Gummi. Die Reibungsenergie wird zum Teil in Wärme umgewandelt, zum Teil aber zum Herauslösen von Partikeln während des Abriebprozesses verbraucht. Die pro Zeiteinheit abgeriebene Reifenmasse ist abhängig von den Materialeigenschaften und dem Zustand der Reibpartner sowie von den Reibkräften selbst, die wiederum sehr stark von der Fahrsituation abhängen (Rauterberg-Wulff 1998). Die Quantifizierung des Reifenabriebs pro gefahrenem Kilometer eines Fahrzeugs lässt sich aus direkten Konzentrationsmessungen im Luv und Lee einer Straße oder aus der Laufleistung und dem Massenverlust der Reifen gewinnen. Mehrere Autoren haben Daten zum Reifenabrieb publiziert (Eldering und Cass 1996; Kleeman und Cass 1998; Rauterberg-Wulff 1998; Hüglin und Gehrig 2000; Weckwerth 2001; Lükewille et al. 2001; Warner et al. 2002; Pregger und Friedrich 2002). Tabelle 5.1 zeigt mittlere Emissionsfaktoren aus dieser Literatur für Reifenabrieb.

**Tabelle 5.1:** Emissionsfaktoren in  $\text{mg km}^{-1}$  für Reifenabrieb, mittlere Literaturwerte mit Angabe des Schwankungsbereichs in Klammern falls bekannt.

Größenklasse	PKW	LKW
Gesamtstaub	$\approx 100$ (53...163)	$\approx 200$ (78...1400)
PM10	$\approx 10$ (6...13)	$\approx 40$ (8...200)
PM2.5	$\approx 0,3$	$\approx 2$

### 5.2.2 Bremsenabrieb

Beim Bremsvorgang wird kinetische Energie des Fahrzeugs im Wesentlichen in Wärme umgewandelt. Dies geschieht an den Bremsbelägen, die gegen einen mitrotierenden Teil des Rades gepresst werden. Dabei sind die Bremsbeläge bereits als Verschleißteile ausgelegt. Ihre Lebensdauer hängt insbesondere vom individuellen Fahrstil ab. Analog zum Reifenabrieb können aus Laufleistung der Bremsbeläge und ihrem Massenverlust Emissionsfaktoren bestimmt werden (Rauterberg-Wulff 1998; Weckwerth 2001; Lükewille et al. 2001; Abu-Allaban et al. 2002; Warner et al. 2002; Pregger und Friedrich 2002). Tabelle 5.2 zeigt mittlere Emissionsfaktoren aus dieser Literatur für Bremsenabrieb.

**Tabelle 5.2:** *Emissionsfaktoren in  $\text{mg km}^{-1}$  für Bremsenabrieb, mittlere Literaturwerte mit Angabe des Schwankungsbereichs in Klammern.*

Größenklasse	PKW	LKW
Gesamtstaub	$\approx 12$ (3...20)	$\approx 40$ (8...100)
PM10	$\approx 8$ (1...10)	$\approx 30$ (4...50)
PM2.5	$\approx 2$ (1...2)	$\approx 7$ (3...8)

### 5.2.3 Fahrbahnabrieb

Die Fahrbahnoberfläche ist den gleichen Kräften wie die Reifenauflfläche ausgesetzt. Die Folge ist wiederum das Auftreten von Abriebpartikeln, die aus der Fahrbahnoberfläche herausgelöst werden. Für diesen Vorgang ist die Oberflächenbeschaffenheit der Fahrbahn wie z.B. Rauigkeit und Verwitterungszustand von großer Bedeutung. Die genaue Quantifizierung gestaltet sich schwieriger als bei Reifen- oder Bremsenabrieb, da die Bestimmung des Massenverlustes durch Wägung nicht möglich ist. Lükewille et al. (2001) geben als Emissionsfaktoren für Fahrbahnabrieb folgende Werte (Tab. 5.3) an:

**Tabelle 5.3:** *Emissionsfaktoren in  $\text{mg km}^{-1}$  für Fahrbahnabrieb.*

Größenklasse	PKW	LKW
Gesamtstaub	15	76
PM10	8	38
PM2.5	4	21

### 5.2.4 Verkehrsbedingte Resuspension und gesamte Grobstaubemission

Unter Resuspension wird im engeren Sinn die Wiederaufwirbelung von Partikeln verstanden, die auf der Erdoberfläche zuvor unter dem Einfluss der Schwerkraft abgelagert worden sind. Bei der verkehrsbedingten Resuspension handelt es sich um die Aufwirbelung von Straßenstaub durch die fahrzeuginduzierte Turbulenz und die Einwirkung der Reifen auf die Fahrbahnoberfläche. Das aufgewirbelte Aerosol besteht im Allgemeinen teilweise aus dem Material, das zuvor als Reifen-, Bremsen- oder Fahrbahnabrieb freigesetzt wurde. In diesem Sinne wird der durch Resuspension emittierte gesamte Grobstaub von einigen Autoren als die Summe aller nicht aus dem Verbrennungsprozess herrührenden Partikelemissionen verstanden. Einen Überblick über die Entwicklung des Forschungsgebiets der verkehrsbedingten Resuspension findet man im Kapitel 1.3. In zahlreichen Veröffentlichungen werden Emissionsfaktoren für den gesamten Grobstaub, die z.T. allerdings sehr unterschiedlich sind, angegeben (Claiborn et al. 1995; Kantamaneni et al. 1996; Eldering und Cass 1996; U.S. EPA 1997; Venkatram et al. 1999; Hüglin und Gehrig 2000; Düring und Lohmeyer 2001; Lükewille et al. 2001; Gillies et al. 2001; Puxbaum et al. 2002; Sternbeck et al. 2002; Abu-Allaban et al. 2002; Warner et al. 2002; Pregger und Friedrich 2002). Tabelle 5.4 zeigt mittlere Werte für Autobahnen aus diesen Arbeiten.

**Tabelle 5.4:** *Emissionsfaktoren in  $\text{mg km}^{-1}$  für die gesamte Grobstaubemission inkl. Resuspension, mittlere Literaturwerte mit Angabe des Schwankungsbereichs in Klammern.*

Größenklasse	PKW	LKW
Gesamtstaub	$\approx 200$ (70...1000)	$\approx 500$ (150...3000)
PM10	$\approx 40$ (25...100)	$\approx 200$ (50...300)
PM2.5	$\approx 10$ (6...20)	$\approx 50$ (30...100)

## 5.3 Die Diffusionsgleichung für Grobstaub

In Analogie zur Diffusionsgleichung für gasförmige Luftbeimengungen (Gl. 2.44) lässt sich für die Ausbreitung von groben Partikeln eine Diffusionsgleichung für das vorliegende zweidimensionale Ausbreitungsproblem formulieren (Gl. 5.1). Im Gegensatz zur Diffusionsgleichung für Gase muss im Falle grober Partikel eine Sedimentationsge-

schwindigkeit  $v_{g,P}$ , die wiederum vom Partikeldurchmesser  $D_P$  abhängig ist, berücksichtigt werden. Die Koagulation, d.h. das Aneinanderhaften von Partikeln aufgrund von Relativbewegungen, kann für grobe Partikel vernachlässigt werden (Seinfeld und Pandis 1998). Neben Ausbreitungsrechnungen auf der lokalen Skala, z.B. zur Bestimmung der Reichweite grober Partikel nach ihrer Emission aus hohen Schornsteinen (Vesovic et al. 2001), werden solche Gleichungen für die Ausbreitung grober Partikel insbesondere für die Prognose von Episoden mit hohen Wüstenstaubkonzentrationen in ariden Gebieten (Nickovic und Dobricic 1996; Nickovic et al. 2001) benutzt.

$$\frac{\partial \overline{c_P}}{\partial t} = -\overline{u} \frac{\partial \overline{c_P}}{\partial x} + v_{g,P} \frac{\partial \overline{c_P}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} K_{xx} \frac{\partial \overline{c_P}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} K_{zz} \frac{\partial \overline{c_P}}{\partial z} + \overline{Q_P}. \quad (5.1)$$

$\overline{c_P}$  bezeichnet die Massendichte der Partikelklasse P in  $\mu\text{g m}^{-3}$ ,  $\overline{Q_P}$  den Quellterm der Partikelklasse P. Es werden 100 Partikelklassen P verwendet mit linear steigenden Durchmesser  $D_P = 1, \dots, 100 \mu\text{m}$ , um mit hoher Auflösung die unterschiedliche Ausbreitung verschieden großer Partikel untersuchen zu können. Die Verwendung der gleichen Schließung für Massendichten wie für Mischungsverhältnisse ist in der atmosphärischen Grenzschicht mit hinreichender Genauigkeit gerechtfertigt (van Dop 1998, Venkatram 1993 und Thomson 1995). Die Sedimentationsgeschwindigkeit  $v_{g,P}$  als stationäre Endfallgeschwindigkeit wird unter Vernachlässigung des Auftriebs der Partikel aus dem Gleichgewicht der Widerstandskraft nach Stokes

$$F_S = 6 \pi \eta_L r_P v_{g,P} \quad (5.2)$$

und der Gravitationskraft

$$F_G = -\frac{4 \pi}{3} r_P^3 \rho_P g \quad (5.3)$$

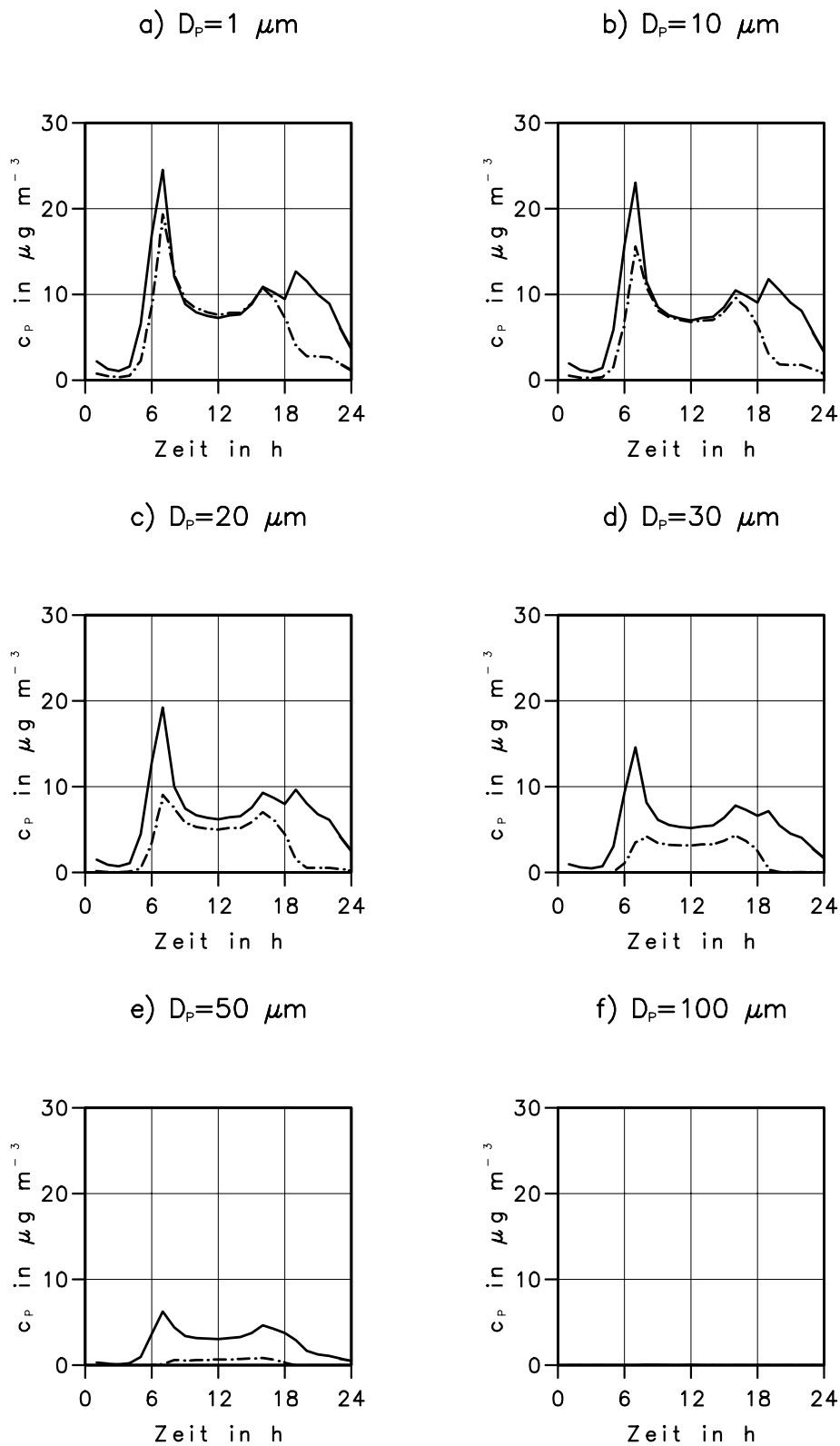
berechnet.  $\eta_L = 1,72 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$  ist die dynamische Viskosität der Luft,  $r_P = \frac{1}{2} D_P$  der Partikelradius,  $\rho_P$  die Partikeldichte, die im Folgenden gleich  $1000 \text{ kg m}^{-3}$  gesetzt wird, und  $g$  die Erdbeschleunigung. Für die Sedimentationsgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Partikeldurchmesser ergibt sich

$$v_{g,P} = -\frac{D_P^2 \rho_P g}{18 \eta_L}. \quad (5.4)$$

## 5.4 Konzentrationsverteilungen

Um zunächst den Einfluss der Partikelgröße auf das Ausbreitungsverhalten zu untersuchen, wurden für verschiedene Partikeldurchmesser Simulationsrechnungen durchgeführt. Die gesamte Grobstaubemission gemäß Tabelle 5.4 von  $200 \text{ mg km}^{-1}$  für Pkw

— mit autobahninduzierter Turbulenz    - - - ohne autobahninduzierte Turbulenz



**Abbildung 5.2:** Tagesgänge der Massendichte grober Partikel im Lee der Autobahn nach verschiedenen Simulationsrechnungen für unterschiedliche Partikeldurchmesser mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz. Die Entfernung von der Autobahn beträgt 25 m, die Höhe über Grund 3 m.

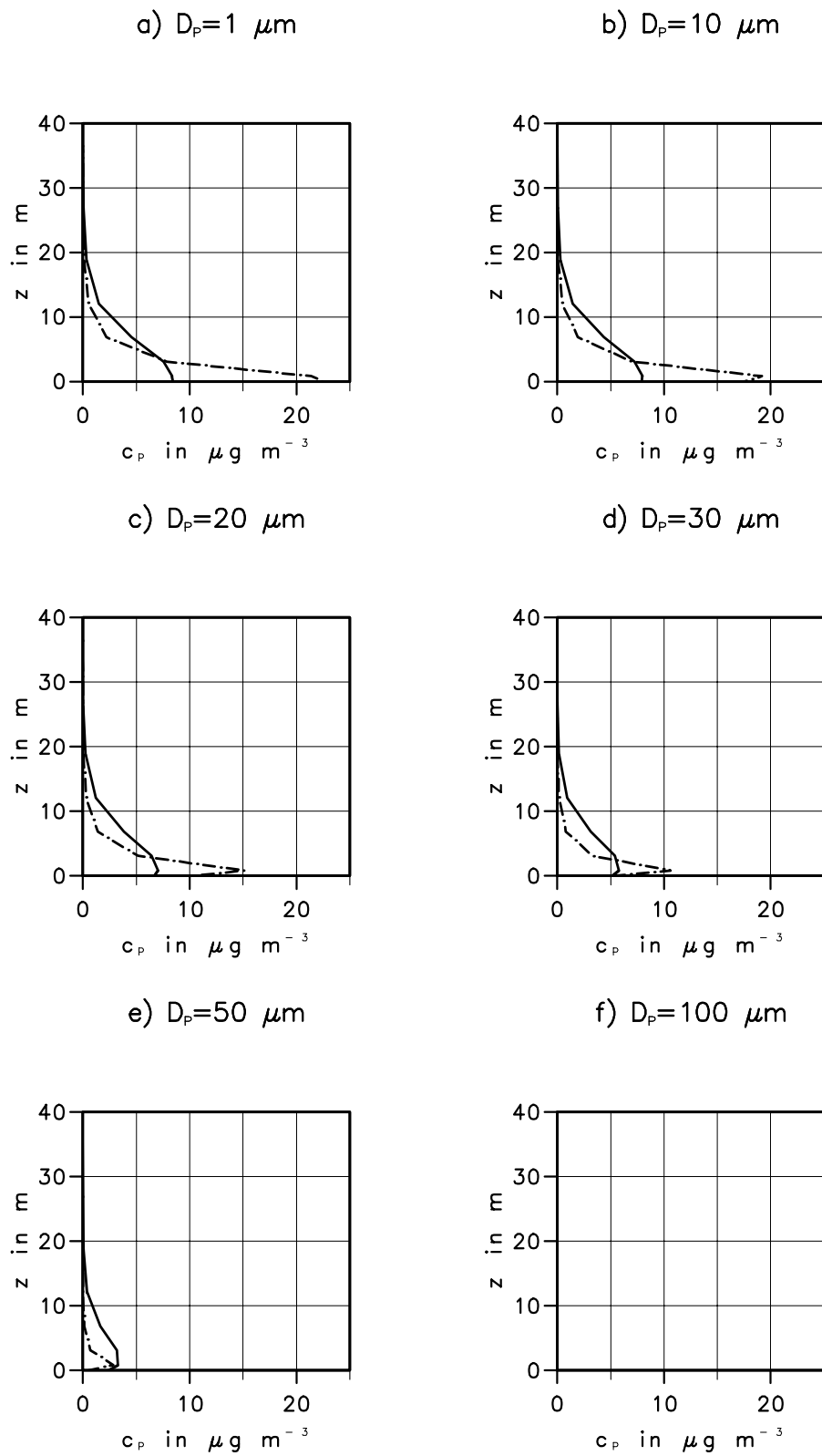
und  $500 \text{ mg km}^{-1}$  für Lkw wurde für jede Simulation in jeweils eine Partikelklasse emittiert. Abbildung 5.2 zeigt Tagesgänge der Massendichte grober Partikel mit unterschiedlichen Durchmessern im Lee der Autobahn mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz. Die Entfernung von der Autobahn beträgt 25 m, die Höhe über Grund 3 m. Startwerte und die Massendichten im Luv der Autobahn betragen  $0 \text{ } \mu\text{g m}^{-3}$ . Für Durchmesser  $D_P = 1 \text{ } \mu\text{m}$  ist das Ausbreitungsverhalten sehr ähnlich wie bei gasförmigen Luftverunreinigungen. Der Tagesgang der Massendichte zeigt den charakteristischen Verlauf mit zwei Maxima morgens und abends. Das morgendliche stärker ausgeprägte Maximum ist auf den Berufsverkehr bei gleichzeitig noch stabiler Grenzschicht zurückzuführen. Das abendliche Maximum tritt erst nach Rückgang der Verkehrsdichten bei stabiler Schichtung auf, da zuvor die höheren Emissionen von der starken turbulenten Durchmischung der konvektiven Grenzschicht überkompensiert werden. Während der labilen Schichtung tagsüber wirkt sich die autobahninduzierte Turbulenz auf die Massendichte in 3 m über Grund nur relativ gering aus. Während der Existenz der stabilen Grenzschicht jedoch ist die Massendichte mit dieser Parametrisierung deutlich höher in 3 m über Grund, da in 25 m Entfernung von der Autobahn bereits mehr Emissionen in diese Höhe mittels turbulenter Diffusion verfrachtet worden sind. Mit zunehmendem Partikeldurchmesser geht die Massendichte im Lee kontinuierlich zurück (Abb. 5.2b-f). Bei Partikeldurchmessern  $D_P = 100 \text{ } \mu\text{m}$  sind die Massendichten am dargestellten Gitterpunkt auf Null zurückgegangen. Erwähnenswert ist des Weiteren, dass der Unterschied zwischen simulierten Massendichten mit und ohne autobahninduzierte Turbulenz mit zunehmendem Partikeldurchmesser allgemein noch etwas zunimmt. Offensichtlich ist es für die exakte Berechnung der Ausbreitung von Grobstaub noch wichtiger, die turbulente Diffusion richtig zu parametrisieren.

Die Vertikalprofile der Massendichten grober Partikel mit verschiedenen Durchmessern bei labiler Schichtung um 13 Uhr in einer Entfernung von 25 m sind in Abbildung 5.3 dargestellt. Anhand der sehr unterschiedlichen Profilneigung wird die Wirkung der autobahninduzierten Turbulenz sehr deutlich. Überdies lässt sich neben der kontinuierlichen Abnahme der Massendichten mit der Partikelgröße ebenfalls eine geringere Fahnenhöhe insbesondere bei großen Durchmessern bei Nichtberücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz erkennen.

Bei stabiler Schichtung um 22 Uhr treten noch größere Unterschiede zwischen Simulationsrechnungen mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz auf (Abb. 5.4). Bei  $D_P = 1 \text{ } \mu\text{m}$  beträgt das bodennahe Maximum der Massendichte  $72 \text{ } \mu\text{g m}^{-3}$  für die Simulation ohne autobahninduzierte Turbulenz, das aus Gründen der



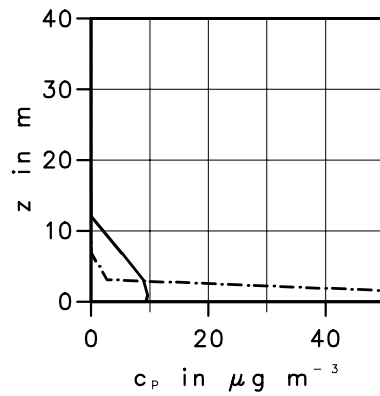
— mit autobahninduzierter Turbulenz    - - - ohne autobahninduzierte Turbulenz



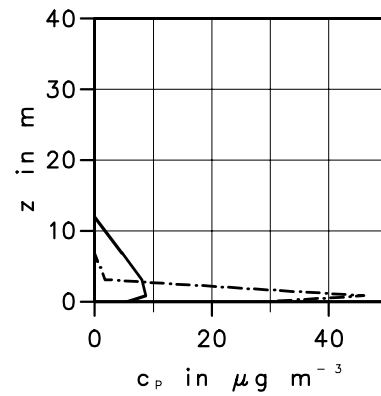
**Abbildung 5.3:** Simulierte Vertikalprofile der Massendichte grober Partikel im Lee der Autobahn für unterschiedliche Partikeldurchmesser mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz um 13 Uhr bei labiler Schichtung. Die Entfernung von der Autobahn beträgt 25 m.

— mit autobahninduzierter Turbulenz    - - - ohne autobahninduzierte Turbulenz

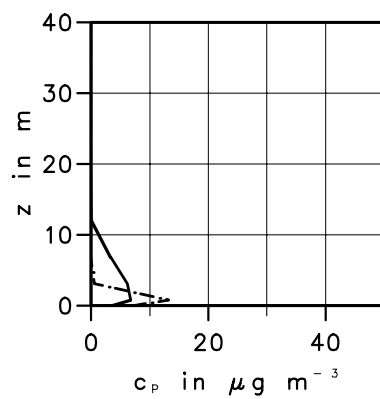
a)  $D_p = 1 \mu\text{m}$



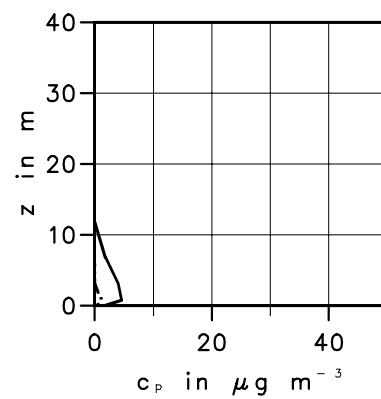
b)  $D_p = 10 \mu\text{m}$



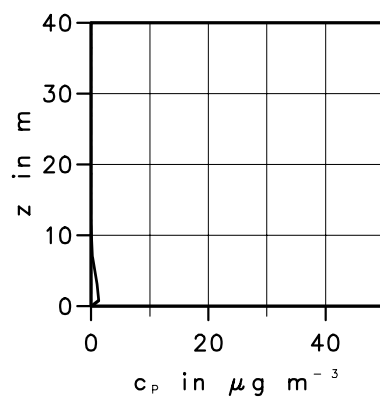
c)  $D_p = 20 \mu\text{m}$



d)  $D_p = 30 \mu\text{m}$



e)  $D_p = 50 \mu\text{m}$



f)  $D_p = 100 \mu\text{m}$

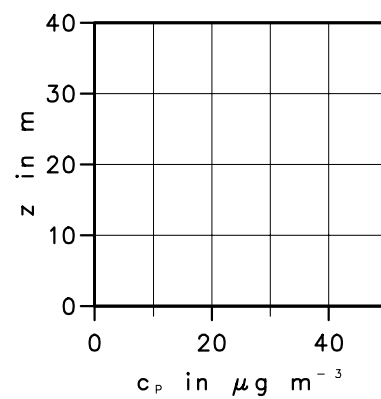


Abbildung 5.4: Wie Abbildung 5.3, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr.

Übersichtlichkeit nicht mehr dargestellt wurde. Mit zunehmendem Partikeldurchmesser geht die bodennahe Massendichte jedoch schon in der dargestellten Entfernung von 25 m sehr schnell zurück, so dass bereits für  $D_P = 30 \mu\text{m}$  nahezu die gesamte Partikelmasse bei der Simulation ohne autobahninduzierte Turbulenz durch Sedimentation aus der Atmosphäre entfernt wurde. Bei der Simulation mit autobahninduzierter Turbulenz jedoch erreichen Partikel mit einem Durchmesser  $D_P = 50 \mu\text{m}$  die dargestellte Entfernung von 25 m.

Abbildung 5.5 zeigt Horizontalprofile der Massendichte grober Partikel um 13 Uhr bei labiler Schichtung in einer Höhe von 3 m über Grund. Das Maximum tritt in der Simulation mit autobahninduzierter Turbulenz näher an der Quelle auf als im Falle der Nichtberücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz (5.5a-d). Im ersten Fall werden die emittierten Partikel infolge der ungleich stärkeren vertikalen Durchmischung sehr schnell bis in eine Höhe von 3 m transportiert, im zweiten Fall dauert es etwas länger und somit liegt das Maximum in etwas größerer Quellentfernung. Mit zunehmendem Partikeldurchmesser wächst wie oben beschrieben die Differenz zwischen den beiden dargestellten Kurven signifikant an. Deutlich zu sehen ist ebenfalls die unterschiedliche Reichweite der Partikel mit einem Durchmesser  $D_P = 50 \mu\text{m}$ . Partikel mit Durchmessern von  $100 \mu\text{m}$  erreichen nur in unmittelbarer Quellnähe bei Berücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz die dargestellte Höhe von 3 m und fallen in der Nachbarschaft der Autobahn sofort aus.

In der stabil geschichteten Atmosphäre um 22 Uhr zeigt sich wiederum ein noch wesentlich größerer Unterschied zwischen den Simulationsrechnungen mit und ohne autobahninduzierte Turbulenz (Abb. 5.5). In der dargestellten Höhe von 3 m steigt im Falle der Nichtberücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz die Massendichte mit der Entfernung nur langsam an. Mit zunehmendem Durchmesser der Partikel erreicht die Massendichte in 3 m Höhe in immer geringeren Entfernungen ihr Maximum, nun allerdings auf weitaus geringerem Niveau. Für Durchmesser von  $30 \mu\text{m}$  ist die Massendichte bereits nahezu Null im gesamten Horizontalprofil. Völlig anders verhält sich die Massendichte, die mit autobahninduzierter Turbulenz simuliert wurde. Für kleine Durchmesser ist das Abklingverhalten nicht von dem eines emittierten Gases ohne schnelle chemische Reaktionen wie CO zu unterscheiden (vgl. Abb. 4.19d). Einem schnellen Abklingen der Massendichte im Nahbereich der Autobahn folgt ein langsamerer Rückgang in größerer Entfernung ab ca. 30 m. Mit Zunahme der Partikeldurchmesser nimmt insbesondere das Abklingen in größeren Entfernungen sehr stark zu. Dementsprechend sinkt die Reichweite der Partikel auf ca. 400 m für  $D_P = 20 \mu\text{m}$ , ca. 200 m für  $D_P = 30 \mu\text{m}$  und ca. 50 m für  $D_P = 50 \mu\text{m}$ . Von den Partikeln mit

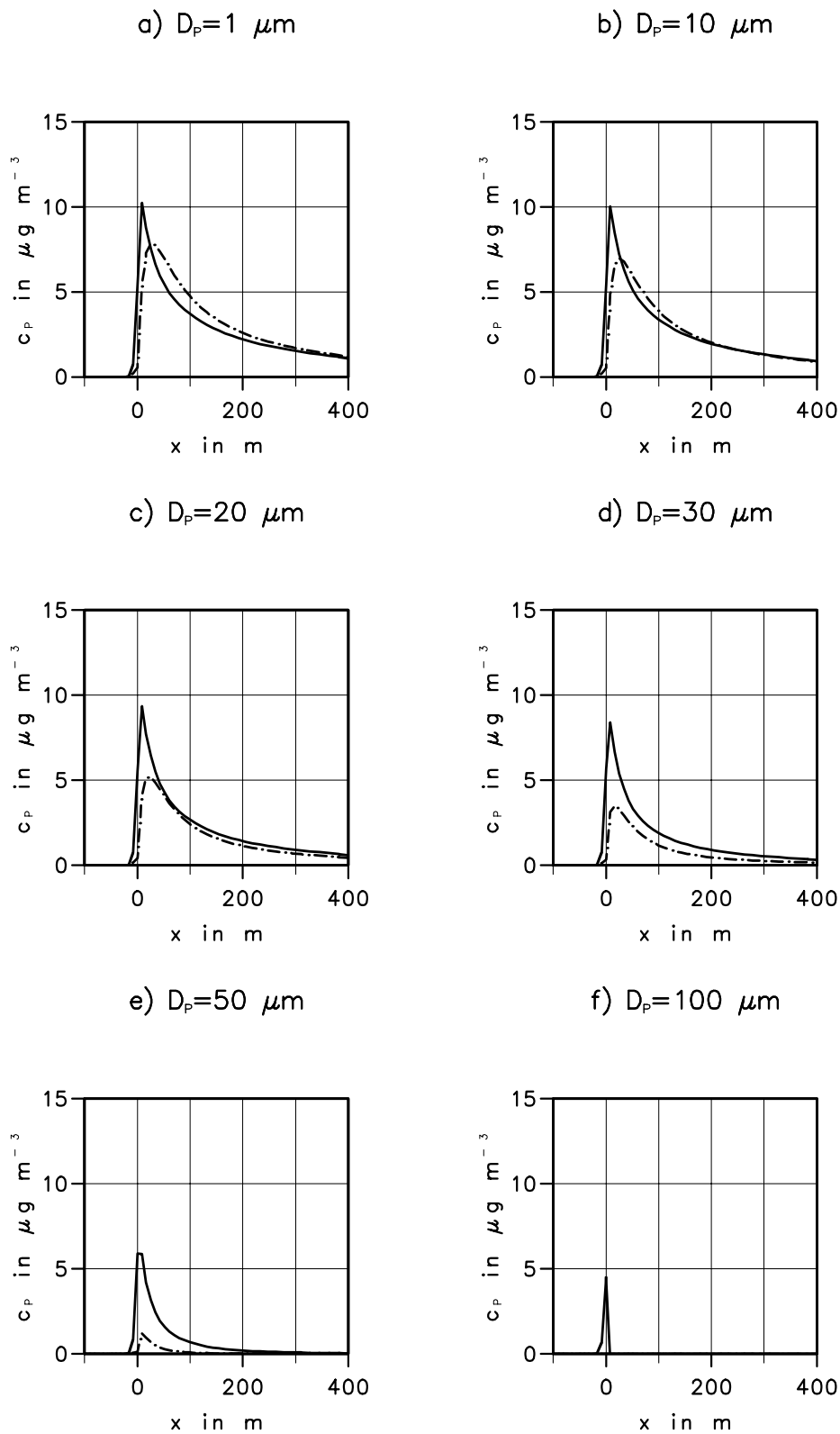
$D_P = 100 \mu\text{m}$  erreicht nur ein kleiner Anteil unmittelbar über der Quelle die dargestellte Höhe von 3 m.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Einfluss der autobahninduzierten Turbulenz auf das Feld der Massendichte von auf der Autobahn emittiertem Grobstaub generell sehr groß ist. Dabei nehmen die Auswirkungen mit zunehmendem Partikeldurchmesser und mit zunehmender Stabilität der thermischen Schichtung der Atmosphäre noch zu. Sowohl autobahninduzierte Turbulenz als auch die Stabilität der Schichtung haben große Auswirkungen auf wichtige Parameter des Ausbreitungsvorgangs wie Fahnenhöhe, Reichweite und maximale Massendichten.

In einer weiteren Simulationsrechnung wurde die Grobstaubemission gemäß Tabelle 5.4 von  $200 \text{ mg km}^{-1}$  für Pkw und  $500 \text{ mg km}^{-1}$  für Lkw auf alle Partikelklassen mit  $D_P = 1, \dots, 100 \mu\text{m}$  gleichmäßig in Bezug auf die Masse verteilt. In jede Partikelklasse wurde somit  $\frac{1}{100}$  der gesamten Masse emittiert. Abbildung 5.7 zeigt Größenverteilungen der Massendichten grober Partikel in verschiedenen Entfernungen im Lee der Autobahn um 13 Uhr bei labiler Schichtung in einer Höhe von 3 m über Grund. Die Fläche unter den Kurven entspricht dabei jeweils der gesamten Massendichte. Wie in den vorherigen Abbildungen in diesem Kapitel sind Ergebnisse von Modellsimulationen mit und ohne autobahninduzierte Turbulenz aufgetragen. In allen Entfernungen sind die kleinen Partikel stärker vertreten als die großen. Mit zunehmender Entfernung sinkt die Massendichte von Partikeln aller Durchmesser ab mit Ausnahme der Massendichte im Nahbereich zwischen 8 m und 25 m für die Simulation ohne autobahninduzierte Turbulenz. Im mittleren Entfernungsbereich von 50 m (c) und 100 m (d) ist die Massendichte kleiner Partikel größer bei der Simulation ohne autobahninduzierte Turbulenz. Hier überwiegen die Auswirkungen der schwächeren turbulenten Durchmischung im Nahbereich. Für große Partikel mit  $D_P > 20 \mu\text{m}$  liegt die Massendichte der Simulation mit autobahninduzierter Turbulenz höher, da sie zugleich der Absinkbewegung entgegenwirkt. In einer Entfernung von 400 m sind die Partikel mit  $D_P > 50 \mu\text{m}$  im Wesentlichen aus der dargestellten Höhe von 3 m nach unten sedimentiert. Der allgemeine Rückgang der Massendichten der relativ kleinen Partikel mit zunehmendem Abstand von der Autobahn ist dabei hauptsächlich auf die turbulente Diffusion in vertikaler Richtung und nicht so sehr auf die Sedimentation zurückzuführen.

Um 22 Uhr bei stabiler Schichtung (Abb. 5.8) ist die Reichweite der Partikel insgesamt stark reduziert gegenüber dem zuvor diskutierten Fall um 13 Uhr. In der dargestellten Höhe von 3 m über Grund nimmt die Massendichte kleiner Partikel im Falle der Nichtberücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz mit der Entfernung zunächst zu,

— mit autobahninduzierter Turbulenz    - - - ohne autobahninduzierte Turbulenz



**Abbildung 5.5:** Horizontalprofile der Massendichte grober Partikel nach verschiedenen Simulationsrechnungen mit jeweils unterschiedlichen Partikeldurchmessern mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz um 13 Uhr bei labiler Schichtung. Die Höhe über Grund beträgt 3 m.

— mit autobahninduzierter Turbulenz    - - - ohne autobahninduzierte Turbulenz

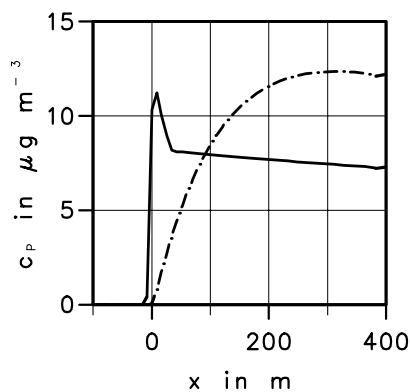
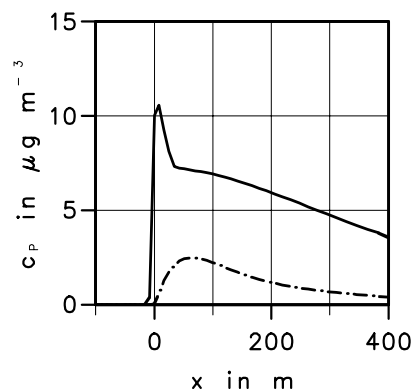
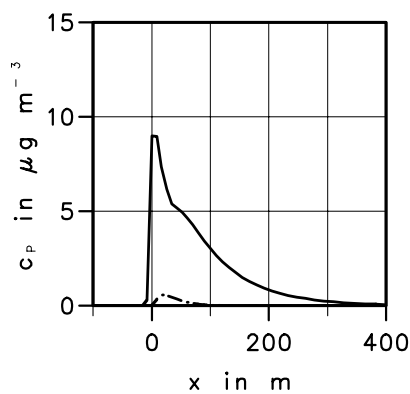
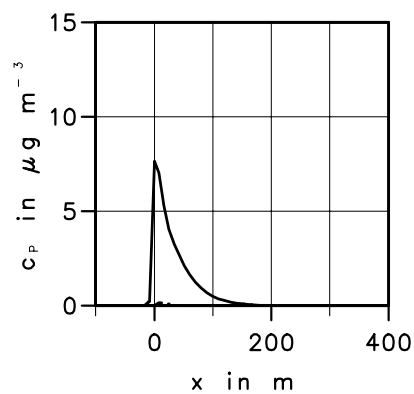
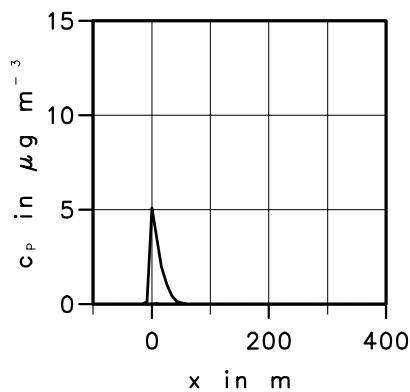
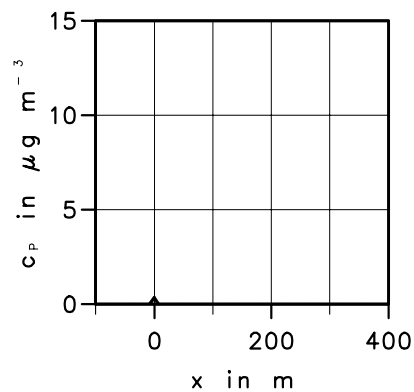
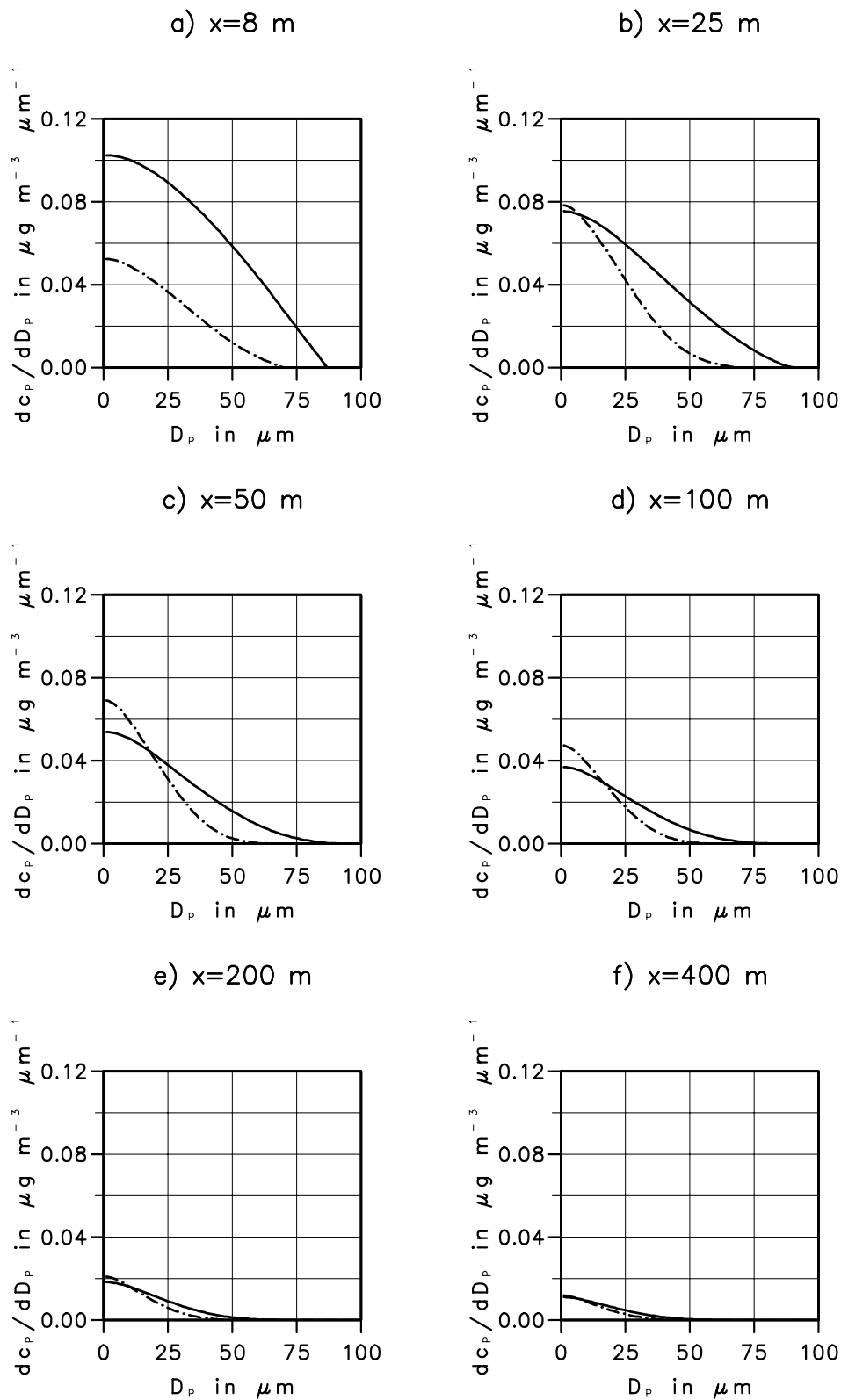
a)  $D_p = 1 \mu\text{m}$ b)  $D_p = 10 \mu\text{m}$ c)  $D_p = 20 \mu\text{m}$ d)  $D_p = 30 \mu\text{m}$ e)  $D_p = 50 \mu\text{m}$ f)  $D_p = 100 \mu\text{m}$ 

Abbildung 5.6: Wie Abbildung 5.5, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr.

— mit autobahninduzierter Turbulenz    - - - ohne autobahninduzierte Turbulenz



**Abbildung 5.7:** Größenverteilung der Massendichten grober Partikel in verschiedenen Entfernungen im Lee der Autobahn mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz um 13 Uhr bei labiler Schichtung. Die Höhe über Grund beträgt 3 m.

— mit autobahninduzierter Turbulenz    - - - ohne autobahninduzierte Turbulenz

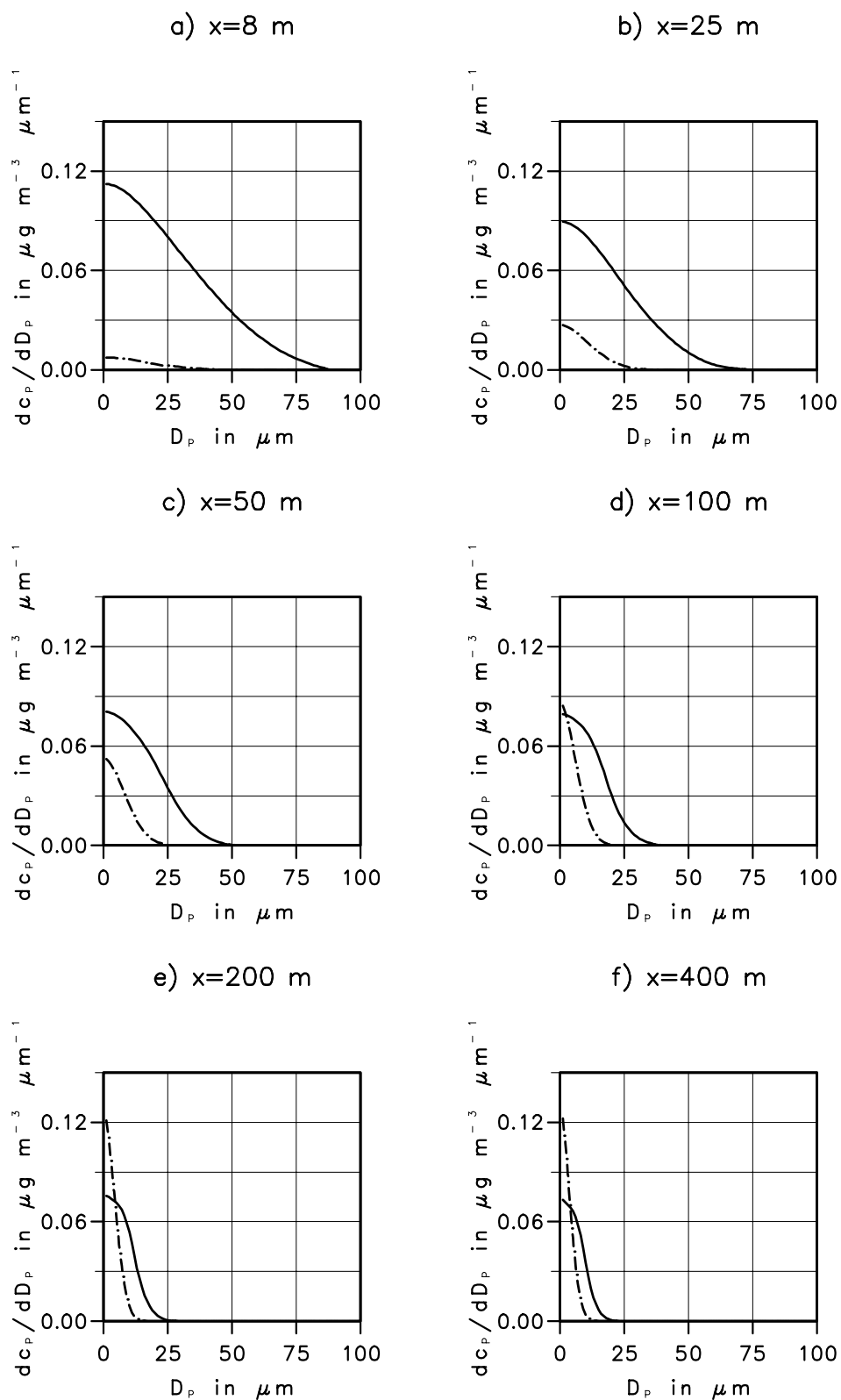


Abbildung 5.8: Wie Abbildung 5.7, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr.



während Partikel mit Durchmessern  $D_P > 40 \mu\text{m}$  diese Höhe im gesamten Horizontalprofil nicht erreichen. Mit größerer Entfernung fehlen immer kleinere Partikel in dieser Höhe, in 400 m Entfernung (f) sind nur noch Partikel mit  $D_P < 12 \mu\text{m}$  vertreten. Die Massendichten aller Partikel nehmen bei Berücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz kontinuierlich mit der Entfernung ab. In der gleichen Entfernung sind nun im Vergleich zur Simulation ohne autobahninduzierte Turbulenz deutlich größere Partikel in 3 m Höhe vorhanden. Der maximale Durchmesser der Partikel, die sich noch in der Atmosphäre befinden, ist im Lee in etwa um einen Faktor zwei größer bei der Simulation mit autobahninduzierter Turbulenz. In 400 m Entfernung werden noch nennenswerte Massendichten für Partikel mit  $D_P < 20 \mu\text{m}$  simuliert. Die autobahninduzierte Turbulenz hat somit einen sehr großen Einfluss auf Größenverteilungen der Massendichten von auf der Autobahn emittiertem Grobstaub.



## 6 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde auf der Basis von Turbulenzmessungen während der BABII-Messkampagne eine Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz entwickelt und in das Modellsystem KAMM/DRAIS integriert. Anhand von Modellsimulationen konnten die Auswirkungen der neuen Parametrisierung sowohl auf gasförmige Luftverunreinigungen als auch auf Grobstaubemissionen der Autobahn dargestellt und analysiert werden.

In den gemessenen Spektren der turbulenten kinetischen Energie werden die Auswirkungen der Autobahn in Form einer signifikanten Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie im Frequenzbereich ab 0,1 Hz und höher insbesondere im Nahbereich sichtbar. Diese kann sowohl bei Nordost- als auch bei Südwestanströmung nachgewiesen werden. Der Betrag der Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie ist dabei von der autobahnusenkrechten Windkomponente abhängig. Um den Anteil der fahrzeuginduzierten Turbulenz an der gesamten autobahninduzierten Turbulenz nachzuweisen, wurde die Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Luv und Lee der Autobahn auf eine Korrelation mit der Verkehrsstärke hin untersucht. Bei geeigneter Normierung konnte im Folgenden ein linearer Zusammenhang zwischen Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Luv und Lee und der Verkehrsstärke gefunden werden. Dabei ist die Korrelation mit der Verkehrsstärke des Lkw-Verkehrs höher als mit der Verkehrsstärke des Pkw-Verkehrs. Dies bestätigt aus der Literatur bekannte Ergebnisse, die die besonders große Wirkung von großen Fahrzeugen auf das Turbulenzfeld aufzeigen. Neben der Abhängigkeit der im Lee zusätzlich auftretenden turbulenten kinetischen Energie kann ebenfalls ein vom Verkehr unabhängiger Anstieg festgestellt werden. Dieser ist auf die Überströmung des als Strömungshindernis wirkenden Dammes, auf dem die Autobahn aus Hochwasserschutzgründen verläuft, zurückzuführen. Die Überströmung kann ebenfalls am Verhalten der vertikalen Geschwindigkeitskomponente im Luv und im Lee der Autobahn nachgewiesen werden, da im Luv positive, im Lee jedoch stets negative Werte auftreten. Die autobahninduzierte Turbulenz besteht somit aus zwei Anteilen, aus einem fahrzeuginduzierten Anteil und aus einem durch die Dammüberströmung bewirkten Anteil.

Aufgrund der gewonnenen Erkenntnisse aus den Turbulenzmessungen wurde im Fol-

genden eine prognostische Gleichung für die zusätzliche, durch die Autobahn produzierte turbulente kinetische Energie aufgestellt. Neben den Termen für den advektiven und turbulenten Transport und die Dissipation wurden Produktionsterme für die fahrzeuginduzierte Turbulenz und die durch die Überströmung produzierte Turbulenz aufgenommen. Ausgegangen wurde dabei von der bekannten Formulierung der Widerstandskraft in einer turbulenten Strömung, auf deren Basis beide Produktionsterme abgeleitet wurden. Durch numerische Integration lässt sich so das Feld der zusätzlichen turbulenten kinetischen Energie im Lee der Autobahn simulieren. Der gemessene mittlere Tagesgang an Wochentagen kann von der Simulation sehr gut reproduziert werden.

Bei der Ausbreitungsrechnung mit dem Modell DRAIS ist die Turbulenz in Form eines Gradientansatzes mit Diffusionskoeffizienten berücksichtigt. Die vertikalen und horizontalen Diffusionskoeffizienten der autobahninduzierten Turbulenz werden einem Vorschlag aus der Literatur folgend als Produkt der Fahrzeughöhe bzw. -breite als charakteristischer Länge und der Quadratwurzel der turbulenten kinetischen Energie als charakteristischer Geschwindigkeit bestimmt. Die gesamten Diffusionskoeffizienten setzen sich dabei additiv aus den autobahninduzierten und den atmosphärischen zusammen. Für die Berechnung der atmosphärischen Diffusionskoeffizienten wird die sog. quellentfernungabhängige Parametrisierung eingesetzt. Konsequenz ist eine ausgeprägte Zunahme der atmosphärischen Diffusionskoeffizienten mit zunehmender Entfernung von der Autobahn. Im Nahbereich dominieren hingegen die autobahninduzierten Diffusionskoeffizienten. Deren Bedeutung nimmt mit zunehmender Stabilität der Atmosphäre zu, da die atmosphärischen Diffusionskoeffizienten bei stabiler Schichtung wesentlich geringer sind als bei labiler. Trotz der geringeren Windgeschwindigkeit nachts ist die Bedeutung der Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung dann größer, da sowohl die fahrzeuginduzierte Turbulenz infolge des geringeren Verkehrs als auch die atmosphärische Turbulenz niedriger liegen.

Zum Vergleich der simulierten Vertikalprofile im Lee der Autobahn standen bei der BABII-Messkampagne gemessene Vertikalprofile der CO-Konzentration zur Verfügung. Die gemessenen Differenzen der Vertikalprofile der CO-Konzentration zwischen Luv und Lee wurden mit Simulationsergebnissen verglichen. Dabei zeigte sich, dass die vertikale Durchmischung bei Nichtberücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz bei der modellierten Schadstofffahne unabhängig von der Stabilität der Schichtung viel zu gering ist. Entsprechend fallen die modellierten Fahnenhöhen zu niedrig aus. Sie entsprechen jedoch den in der Literatur dokumentierten Fahnenhöhen, wie sie bei einer großen Ausbreitungsmesskampagne in der Vergangenheit in vergleichbarer Quell-

entfernung detektiert wurden. Dies kann als Hinweis auf die Güte der verwendeten quellentfernungsabhängigen Parametrisierung gedeutet werden. Bei Berücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz zeigt sich eine zufrieden stellende Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung. Insbesondere wird nun auch die Fahnenhöhe richtig simuliert. Dabei reicht es jedoch nicht aus, nur den fahrzeuginduzierten Anteil zu parametrisieren. Besonders bei stabiler Schichtung und geringem Verkehr ist die Berücksichtigung der Turbulenzproduktion infolge der Dammüberströmung unerlässlich für die richtige Beschreibung des Ausbreitungsprozesses.

Mit der neuen Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz wurden im Folgenden Modellsimulationen mit dem Gasphasenmechanismus RADM2 durchgeführt. Dieses Chemiemodell erlaubt die Simulation der zeitlichen und räumlichen Konzentrationsverteilungen einer Vielzahl von Substanzen. Durch Vorgabe mittlerer Emissionen von Baden-Württemberg im Modellgebiet konnten realistische Konzentrationen der Reaktionspartner für die Emissionen auf der Autobahn in der Anströmung sichergestellt werden. Die nur sehr langsam reagierenden Substanzen wie CO oder die Benzol und Toluol enthaltende Modellschubstanz TOL zeigen das erwartete vom Transport dominierte Verhalten. Die Fahnenhöhe nimmt stetig mit der Entfernung von der Autobahn zu und ist bei labiler Schichtung deutlich größer als bei stabiler. Das Abklingverhalten von Substanzen, die an schnellen chemischen Reaktionen beteiligt sind, wird dagegen sehr stark modifiziert durch die Chemie und unterscheidet sich erheblich von den nahezu inerten Substanzen wie CO. Infolge der schnellen Wechselwirkungen von NO mit Ozon zeigt NO ein viel schnelleres Abklingen im Lee als CO, während NO<sub>2</sub>, das kaum emittiert wird, sehr viel langsamer abklingt, da es im Lee sehr stark produziert wird. Gleichzeitig wird im Lee ein Defizit der Ozonkonzentration sichtbar. HONO, dessen Funktion als OH-Quelle in der Literatur diskutiert wird, wird im Lee sehr schnell produziert. Starke Einbrüche der bodennahen Konzentration weisen die für die troposphärische Chemie insgesamt sehr bedeutenden Radikale OH und HO<sub>2</sub> auf. Sie gehen eine Vielzahl von Reaktionen mit von den Fahrzeugen emittierten Substanzen, aber auch mit sekundären Reaktionsprodukten der Emissionen ein. Das OH-Radikal weist dabei interessante Strukturen auf. So steigt z.B. die OH-Konzentration im oberen Fahnenabschnitt im Lee der Autobahn bei einem gleichzeitigen Rückgang am Boden deutlich an. Nachts zeigen die Konzentrationen der schnell reagierenden Substanzen NO<sub>3</sub> und N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> einen ausgeprägten Rückgang im Lee. Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Autobahn nicht nur in den Konzentrationsverteilungen der emittierten Substanzen sichtbar wird, sondern auch die Konzentrationen einer Vielzahl von nicht emittierten Substanzen erheblich modifiziert.

Im letzten Abschnitt der Arbeit wurde die Ausbreitung von auf der Autobahn emittiertem Grobstaub simuliert. Trotz der zahlreichen physikalischen und chemischen Wechselwirkungen, die Partikel mit der Umwelt aufweisen, ist bei der Analyse von gemessenen Größenverteilungen und Konzentrationen das Problem der Quellzuordnung bisher nur unzureichend gelöst. Da der Gesetzgeber aber aufgrund der in der Literatur nachgewiesenen Auswirkungen hoher Aerosolkonzentrationen auf die Gesundheit des Menschen an einer baldigen Reduzierung interessiert ist, ist das Ausbreitungsverhalten von emittiertem Aerosol Gegenstand aktueller Forschung. Neben dem Ruß aus Dieselmotoren treten Kraftfahrzeuge insbesondere durch Abrieb- und Aufwirbelungsemissionen auf. Dokumentiert sind Reifen- und Bremsenabrieb, Fahrbahnabrieb und die Aufwirbelung von auf der Fahrbahn aufliegendem Staub durch die Reifen und die fahrzeuginduzierte Turbulenz, die sog. Resuspension. Diese Quellterme sind vermutlich noch mit relativ großen Fehlerbalken behaftet. Modellsimulationen des Ausbreitungsverhaltens von Grobstaub mit Partikeldurchmessern von 1  $\mu\text{m}$  bis 100  $\mu\text{m}$  zeigen eine sehr starke Abhängigkeit der Massendichten von der Partikelgröße. Zugleich wurde bei diesen Modellrechnungen die starke Auswirkung der Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz auf die Konzentrationsverteilungen dargelegt. Diese nehmen mit zunehmendem Partikeldurchmesser und mit zunehmender Stabilität der thermischen Schichtung noch zu. Wichtige Parameter des Ausbreitungsvorgangs wie Fahnenhöhe, Reichweite und maximale Massendichte hängen sowohl von der Berücksichtigung der autobahninduzierten Turbulenz als auch von der thermischen Schichtung ab. Die Größenverteilungen der Massendichte grober Partikel zeigen mit zunehmender Entfernung von der Autobahn, wie die größeren Partikel allmählich aus der Atmosphäre entfernt werden. Mit Hilfe dieser Modellrechnungen konnte das Aussehen der gemessenen Aerosolgrößenverteilungen für große Partikel erklärt werden.

Der in der vorliegenden Arbeit hergeleitete Produktionsterm für die fahrzeuginduzierte Turbulenz kann ebenfalls für die Simulation der Konzentrationsverteilungen in Straßenschluchten oder in noch größeren Gebieten wie z.B. Stadtteilen verwendet werden. In Straßenschluchten wird allgemein mit einem noch größeren Einfluss der fahrzeuginduzierten Turbulenz auf die Konzentrationsfelder bei insgesamt höherem Konzentrationsniveau als an Autobahnen gerechnet.

## 7 Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
$a, a'$		Konstanten der Koordinatentransformation
$A$	$\text{m}^2$	Stirnfläche eines Strömungshindernisses
$A_D$	$\text{m}^2$	Stirnfläche des Autobahndammes
$A_j$	$\text{ppb}^{-1} \text{ s}^{-1}$	empirischer Koeffizient der bimolekularen Reaktion j
$b, b'$		Konstanten der Koordinatentransformation
$B_{Kfz}$	m	Fahrzeugbreite
$c_w$		Widerstandsbeiwert eines Fahrzeuges
$c_{w,D}$		Widerstandsbeiwert des Autobahndammes
$c_i$	ppb	Konzentration als Volumenmischungsverhältnis einer Substanz i
$c_p$	$\text{J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_P$	$\mu\text{g m}^{-3}$	Massendichte der Partikelklasse P
$C_{ii}(\tau)$	$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$	Autokovarianzfunktion der i-ten Koordinate
$D$	$\text{s}^{-1}$	Deformation des Strömungsfeldes
$D_P$	$\mu\text{m}$	Durchmesser der Partikel der Partikelklasse P
$\bar{e}$	$\text{m}^2 \text{ s}^{-2}$	turbulente kinetische Energie
$E_j$	$\text{J mol}^{-1}$	molare Aktivierungsenergie der bimolekularen Reaktion j
$f$	$\text{s}^{-1}$	Frequenz
$f_c$	$\text{s}^{-1}$	Coriolisparameter
$F_{D,i}$	$\text{ppb m s}^{-1}$	Depositionsfluss der Substanz i
$F_G$	$\text{kg m s}^{-2}$	Gewichtskraft auf ein Partikel
$F_S$	$\text{kg m s}^{-2}$	Widerstandskraft nach Stokes
$F_u$	m	Fouriertransformierte von $u'(t)$
$F_W$	$\text{kg m s}^{-2}$	Widerstandskraft in turbulenter Strömung
$g$	$\text{m s}^{-2}$	Erdbeschleunigung
$h$	m	Höhe der stabilen Grenzschicht
$H$	m	Höhe des Modellgebiets
$H_D$	m	Höhe des Autobahndammes
$H_{Kfz}$	m	Fahrzeughöhe

$k_j$	verschiedene	Geschwindigkeitskonstante der Reaktion j
$K_{\Upsilon}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient der Beispielfunktion $\Upsilon$
$K_h$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient für den Austausch von Wärme
$K_m$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient für den Austausch von Impuls
$K_{xx}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient für Luftbeimengungen in horizontaler Richtung
$K_{zz}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient für Luftbeimengungen in vertikaler Richtung
$K_{xx}^{AB}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	autobahninduzierter turbulenter Diffusionskoeffizient für Luftbeimengungen in horizontaler Richtung
$K_{zz}^{AB}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	autobahninduzierter turbulenter Diffusionskoeffizient für Luftbeimengungen in vertikaler Richtung
$K_{xx}^{Atm.}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient für Luftbeimengungen in horizontaler Richtung gemäß quellentfernungsabhängiger Parametrisierung
$K_{zz}^{Atm.}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient für Luftbeimengungen in vertikaler Richtung gemäß quellentfernungsabhängiger Parametrisierung
$l$	m	Mischungsweg
$L$	m	Länge eines Teilstücks der Autobahn
$L_i$	$\text{ppb s}^{-1}$	lokalzeitlicher Rückgang der Konzentration der Substanz i aufgrund von chemischen Umwandlungen
$L_*$	m	Monin-Obuchow'sche Stabilitätslänge
$N$		Anzahl der Fahrzeuge
$p$	Pa	Luftdruck
$p_0$	Pa	Normaldruck
$P$	$\text{kg m}^2 \text{s}^{-3}$	Leistung
$P_i$	$\text{ppb s}^{-1}$	lokalzeitliche Produktion der Konzentration der Substanz i aufgrund von chemischen Umwandlungen
$P_{\dot{U}}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$	Produktion an turbulenter kinetischer Energie durch die Überströmung des Autobahndammes
$P_V$	$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$	Produktion an turbulenter kinetischer Energie durch fahrzeuginduzierte Turbulenz
$PMx$	$\mu\text{g m}^{-3}$	Massendichte der Partikel mit Durchmessern $\leq x \mu\text{m}$



$Pr$		turbulente Prandtl-Zahl
$q_s$	$\text{K s}^{-1}$	Divergenz von Strahlungsflüssen und Phasenumwandlungen
$q_T$	$\text{g kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$	Phasenumwandlungen
$q_i$		Ähnlichkeitsfunktion für das Energiedichtespektrum
$Q_P$	$\mu\text{g m}^{-3} \text{ s}^{-1}$	lokalzeitliche Änderung der Massendichte der Partikelklasse P aufgrund von Emissionen
$Q_i$	$\text{ppb s}^{-1}$	lokalzeitliche Änderung der Konzentration der Substanz i aufgrund von Emissionen
$r_P$	$\mu\text{m}$	Radius der Partikel der Partikelklasse P
$R_{E,w}$		Euler'sche Korrelationsfunktion für die vertikale Windkomponente
$R$	$\text{J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$	individuelle Gaskostante
$R_{L,w}$		Lagrange'sche Korrelationsfunktion für die vertikale Windkomponente
$R^*$	$\text{J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	universelle Gaskostante
$\vec{R}$	$\text{m s}^{-2}$	Reibungskraft
$Ri$		Richardson-Zahl
$s$	$\text{g kg}^{-1}$	spezifische Feuchte
$S_{L,w}$		Lagrange'sches Energiedichtespektrum für die vertikale Windkomponente
$S_u, S_v, S_w$	$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$	Turbulentes Energiedichtespektrum der longitudinalen, lateralen bzw. vertikalen Windkomponente
$t$	$\text{s}$	Zeit
$T$	$\text{K}$	Lufttemperatur
$u$	$\text{m s}^{-1}$	x-Komponente des Windes (senkrecht zur Autobahn)
$u_g$	$\text{m s}^{-1}$	x-Komponente des geostrophischen Windes
$u_*$	$\text{m s}^{-1}$	Schubspannungsgeschwindigkeit
$v$	$\text{m s}^{-1}$	y-Komponente des Windes (parallel zur Autobahn)
$v_{D,i}$	$\text{m s}^{-1}$	Depositionsgeschwindigkeit der Substanz i
$v_g$	$\text{m s}^{-1}$	y-Komponente des geostrophischen Windes
$v_{g,P}$	$\text{m s}^{-1}$	Sedimentationsgeschwindigkeit
$\vec{v}$	$\text{m s}^{-1}$	Windvektor
$V$	$\text{m s}^{-1}$	Fahrzeuggeschwindigkeit
$w$	$\text{m s}^{-1}$	z-Komponente des Windes
$w_*$	$\text{m s}^{-1}$	konvektiver Geschwindigkeitsmaßstab

$x$	m	kartesische Koordinate senkrecht zur Autobahn
$x_q$	m	Quellentfernung
$X$		dimensionslose Quellentfernung bei labiler Schichtung
$X_L$	m	Länge des Simulationsgebiets in x-Richtung
$X'$		dimensionslose Quellentfernung bei stabiler Schichtung
$y$	m	kartesische Koordinate parallel zur Autobahn
$z$	m	kartesische vertikale Koordinate
$z_i$	m	Höhe der konvektiven Grenzschicht
$z_0$	m	Rauhigkeitslänge
$\alpha$		Longitudinale Horizontalkoordinate im transformierten System
$\beta, \beta'$		Parameter für Spreizung des Gitters in vertikaler bzw. horizontaler Richtung
$\beta_w$		Transformationsfaktor zwischen Euler'scher und Lagrange'scher Korrelationsfunktion
$\gamma$	K m <sup>-1</sup>	Temperaturgradient oberhalb der Grenzschicht
$\gamma_{kr}$	K m <sup>-1</sup>	Kritischer Temperaturgradient zur Bestimmung der Höhe der stabilen Grenzschicht
$\epsilon$	m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup>	Dissipation der turbulenten kinetischen Energie
$\zeta$		Stabilitätsmaß
$\eta$		Vertikale Koordinate im transformierten System
$\eta_L$	Pa s	dynamische Viskosität der Luft
$\theta$	K	potentielle Temperatur
$\theta_G$	K	potentielle Temperatur des Referenzzustands
$\theta^*$	K	Abweichung der potentiellen Temperatur vom Referenzzustand
$\theta_*$	K	charakteristische potentielle Temperatur
$\theta_0$	K	bodennahe potentielle Temperatur
$\kappa$		von-Karman-Konstante
$\rho$	kg m <sup>-3</sup>	Luftdichte
$\rho_P$	kg m <sup>-3</sup>	Dichte der Partikel
$\rho_V$	h <sup>-1</sup>	Verkehrsstärke
$\sigma_u, \sigma_v, \sigma_w$	m s <sup>-1</sup>	Standardabweichung der longitudinalen, lateralen bzw. vertikalen Windkomponente
$\sigma_z^2$	m <sup>2</sup>	mittlere quadratische vertikale Abweichung eines Teilchens von der Hauptstromrichtung

---

$\tau$	s	Ausbreitungszeit, zeitliche Verschiebung
$\varphi$	°	geographische Breite
$\Delta CO$	ppb	Differenz der CO-Konzentration zwischen den Türmen im Luv und im Lee der Autobahn
$\Delta t$	s	Zeitintervall
$\Delta x_Q$	m	Breite des Gittervolumens in x-Richtung an der Quelle
$\Delta z_Q$	m	Höhe des Gittervolumens an der Quelle
$\Lambda$	m	Längenskala bei Bestimmung der Dissipation
$\Pi$		Exnerfunktion
$\Pi_G$		Exnerfunktion des Referenzzustands
$\Pi^*$		Abweichung der Exnerfunktion vom Referenzzustand
$\Upsilon$	verschiedene	Bespielfunktion für Reynoldszerlegung und Gradientansatz
$\Phi$	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$	Geopotential
$\Phi_h$		Profilfunktion für Wärme
$\Phi_m$		Profilfunktion für Impuls
$\Psi$		dimensionslose Dissipationsrate
$\nabla$	$\text{m}^{-1}$	Nablaoperator



# Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung der Diffusion eines Luftpakets unter drei verschiedenen Turbulenzbedingungen. . . . .	22
2.2	X-Z-Darstellung der untersten 100 m des horizontal und vertikal variablen Modellgitters. . . . .	29
3.1	Schematische Darstellung des Horizontalschnittes (oben) und Vertikalschnittes (unten) eines Teils des BABII-Messaufbaus. . . . .	35
3.2	Photographie des BABII-Messfeldes mit den zwei Messtürmen links und rechts der Autobahn von einer nahe gelegenen Autobahnbrücke mit Blickrichtung Mannheim. . . . .	36
3.3	Spektren der vertikalen (oben links), longitudinalen (unten links) und lateralen (unten rechts) Windgeschwindigkeitskomponente am 19.05.2001 für das Zeitintervall 16:30 - 17:00 MESZ bei Nordostwind ( $32^\circ$ ; $1,7 \text{ m s}^{-1}$ ). . . . .	38
3.4	Spektren der vertikalen (oben links), longitudinalen (unten links) und lateralen (unten rechts) Windgeschwindigkeitskomponente am 19.05.2001 für das Zeitintervall 18:00 - 18:30 MESZ bei Nordostwind ( $19^\circ$ ; $1,2 \text{ m s}^{-1}$ ) während einer Vollsperrung der Autobahn. . . . .	39
3.5	Spektren der vertikalen (oben links), longitudinalen (unten links) und lateralen (unten rechts) Windgeschwindigkeitskomponente am 27.04.2001 für das Zeitintervall 18:00 - 18:30 MESZ bei Westwind ( $270^\circ$ ; $1,8 \text{ m s}^{-1}$ ). . . . .	40
3.6	Mit der Fahrzeuggeschwindigkeit $V$ normierte Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Mast 1 und Mast 2 als Funktion der normierten straßensenkrechten Windkomponente u. . . . .	41
3.7	Mittlerer Tagesgang der Pkw-Verkehrsstärke wochentags, samstags und sonntags während der BABII-Messkampagne . . . . .	43
3.8	Wie Abbildung 3.7, aber für die Lkw-Verkehrsstärke. . . . .	43

3.9	Normierte Differenz der turbulenten kinetischen Energie zwischen Mast 1 und Mast 2 als Funktion der Pkw-Verkehrsstärke. . . . .	45
3.10	Wie Abbildung 3.9, aber als Funktion der Lkw-Verkehrsstärke. . . . .	45
3.11	Mittlere Vertikalwinde bei Südwestwind und bei Nordostwind. Die Autobahn liegt zwischen Mast 1 und Mast 2. . . . .	46
3.12	Mittlerer Tagesgang der normierten Differenz der an Mast 1 und Mast 2 gemessenen turbulenten kinetischen Energie an Wochentagen. Die gestrichelten Kurven zeigen die Simulationsergebnisse. . . . .	53
3.13	Vertikaler Diffusionskoeffizient $K_{zz}$ in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn für die Standardparametrisierung, mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und Turbulenz infolge der Dammüberströmung bei stark labiler Schichtung um 13 Uhr. . . . .	54
3.14	Wie Abbildung 3.13, aber bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr. . . . .	57
3.15	Wie Abbildung 3.13, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr. . . . .	58
3.16	Horizontaler Diffusionskoeffizient $K_{xx}$ in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn für die Standardparametrisierung, mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und mit fahrzeuginduzierter Turbulenz und Turbulenz infolge der Dammüberströmung um 13 Uhr. . . . .	59
3.17	Wie Abbildung 3.16, aber bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr. . . . .	60
3.18	Wie Abbildung 3.16, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr. . . . .	61
4.1	Gemessene und simulierte Vertikalprofile der Differenz der CO-Konzentration zwischen den Türmen auf der Nordost- und Südwestseite am 16.05.2001 um 6 Uhr bei neutraler Schichtung. . . . .	64
4.2	Wie Abbildung 4.1, aber am 15.05.2001 um 12 Uhr bei labiler Schichtung. . . . .	65
4.3	Vertikalprofile der Konzentration eines Tracers in einer Entfernung von 100 m von einer Linienquelle. Vergleich von Messdaten (Punkte) des Project Prairie Grass und Modellrechnungen (Linie) mit einem Lagrange'schen Partikelmodell (Ley und Thomson 1983). Von a) nach d) zunehmend labile Schichtung. . . . .	66
4.4	Wie Abbildung 4.1, aber am 18.05.2001 um 20 Uhr bei stabiler Schichtung. . . . .	67

4.5	Vertikalprofile der Konzentration eines Tracers in einer Entfernung von 100 m von einer Linienquelle. Vergleich von Messdaten (Punkte) des Project Prairie Grass und Modellrechnungen (Linie) mit einem Lagrange'schen Partikelmodell (Ley und Thomson 1983). Von a) nach c) abnehmend stabile Schichtung. . . . .	67
4.6	Berechnete Tagesgänge der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn in einer Höhe von 3 m über Grund. . . . .	70
4.7	Wie Abbildung 4.6. . . . .	71
4.8	Wie Abbildung 4.6. . . . .	72
4.9	Berechnete Vertikalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn bei stark labiler Schichtung um 13 Uhr. . . . .	74
4.10	Wie Abbildung 4.9. . . . .	76
4.11	Berechnete Vertikalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr. . . . .	77
4.12	Wie Abbildung 4.11. . . . .	78
4.13	Berechnete Vertikalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Entfernungen von der Autobahn bei stabiler Schichtung um 22 Uhr. . . . .	80
4.14	Wie Abbildung 4.13. . . . .	81
4.15	Berechnete Horizontalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Höhen über Grund bei stark labiler Schichtung um 13 Uhr. . . . .	83
4.16	Wie Abbildung 4.15. . . . .	84
4.17	Berechnete Horizontalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Höhen über Grund bei leicht labiler Schichtung um 18 Uhr. . . . .	86
4.18	Wie Abbildung 4.17. . . . .	87
4.19	Berechnete Horizontalprofile der Konzentrationen der angegebenen Substanzen in verschiedenen Höhen über Grund bei stabiler Schichtung um 22 Uhr. . . . .	89

4.20	Wie Abbildung 4.19. . . . .	90
5.1	Mittlere Größenverteilungen der Massendichte des städtischen und ländlichen Aerosols als Funktion des Partikeldurchmessers. . . . .	92
5.2	Tagesgänge der Massendichte grober Partikel im Lee der Autobahn nach verschiedenen Simulationsrechnungen für unterschiedliche Partikeldurchmesser mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz. Die Entfernung von der Autobahn beträgt 25 m, die Höhe über Grund 3 m. . . . .	97
5.3	Simulierte Vertikalprofile der Massendichte grober Partikel im Lee der Autobahn für unterschiedliche Partikeldurchmesser mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz um 13 Uhr bei labiler Schichtung. Die Entfernung von der Autobahn beträgt 25 m. . . . .	99
5.4	Wie Abbildung 5.3, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr. . . . .	100
5.5	Horizontalprofile der Massendichte grober Partikel nach verschiedenen Simulationsrechnungen mit jeweils unterschiedlichen Partikeldurchmessern mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz um 13 Uhr bei labiler Schichtung. Die Höhe über Grund beträgt 3 m. . . . .	103
5.6	Wie Abbildung 5.5, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr. . . . .	104
5.7	Größenverteilung der Massendichten grober Partikel in verschiedenen Entfernungen im Lee der Autobahn mit und ohne Parametrisierung der autobahninduzierten Turbulenz um 13 Uhr bei labiler Schichtung. Die Höhe über Grund beträgt 3 m. . . . .	105
5.8	Wie Abbildung 5.7, aber bei stabiler Schichtung um 22 Uhr. . . . .	106



# Tabellenverzeichnis

5.1	Emissionsfaktoren in $\text{mg km}^{-1}$ für Reifenabrieb, mittlere Literaturwerte mit Angabe des Schwankungsbereichs in Klammern falls bekannt. . . .	93
5.2	Emissionsfaktoren in $\text{mg km}^{-1}$ für Bremsenabrieb, mittlere Literaturwerte mit Angabe des Schwankungsbereichs in Klammern. . . . .	94
5.3	Emissionsfaktoren in $\text{mg km}^{-1}$ für Fahrbahnabrieb. . . . .	94
5.4	Emissionsfaktoren in $\text{mg km}^{-1}$ für die gesamte Grobstaubemission inkl. Resuspension, mittlere Literaturwerte mit Angabe des Schwankungsbereichs in Klammern. . . . .	95
A.1	Substanzen, für die in RADM2 eine prognostische Gleichung gelöst wird.	139
A.2	Photolysereaktionen in RADM2 . . . . .	141
A.3	Thermische Reaktionen in RADM2 . . . . .	142



# Literaturverzeichnis

- Abu-Allaban, M., J. A. Gillies, A. W. Gertler, R. Clayton und D. Proffitt (2002). Determination of on-road  $\text{PM}_{10}$  and  $\text{PM}_{2.5}$  emission rates using roadside measurements. In: P. Sturm und S. Minarik (Hrsg.), *11th International Symposium: Transport and Air Pollution*, Band 81, S. 377–384. Technische Universität Graz: R. Pischinger.
- Adams, H. S., M. J. Nieuwenhuijsen, R. N. Colvile, M. J. Older und M. Kendall (2002). Assessment of road users elemental carbon personal exposure levels, London, UK. *Atmos. Environ.* 36, 5335–5342.
- Adrian, G. und F. Fiedler (1991). Simulation of unstationary wind and temperature fields over complex terrain and comparison with observations. *Beitr. Phys. Atmos.* 64, 27–48.
- Bagnold, R. A. (1941). *The Physics of Blown Sands and Desert Dunes*. New York: Chapman & Hall.
- Bär, M. und K. Nester (1992). Parameterization of trace gas dry deposition velocities for a regional mesoscale diffusion model. *Ann. Geophysicae.* 10, 912–923.
- Barad, M. L. (1958). Project Prairie Grass, a field program in diffusion, Vol. 1. Geophysics Research Paper 59, Air Force Cambridge Research Center. AFCRC-TR-58-235.
- Batchelor, G. K. (1949). Diffusion in a field of homogenous turbulence. I. Eulerian Analysis. *Aust. J. Sci. Res.* 2, 437.
- Bäumer, D. (1999). Numerische Simulationen zur Ausbreitung von Luftbeimengungen im Nahbereich eines Autobahnabschnittes. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).
- Bitzer, A. (1999). Vergleich von gemessenen und berechneten Emissionsdaten für einen Autobahnabschnitt. Auswertung des Meßexperiments BAB656. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).

- Blackadar, A. K. (1962). The vertical distribution of wind and turbulent exchange in a neutral atmosphere. *J. Geophys. Res.* 67, 3095–3102.
- Businger, J., J. C. Wyngaard, Y. Izumi und E. F. Bradley (1971). Flux-profile relationships in the atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.* 28, 181–189.
- BUWAL (2001). PM10 - Fragen und Antworten zu Eigenschaften, Emissionen, Immissionen, Auswirkungen und Maßnahmen. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft, Bern, Schweiz.
- Cadle, S. H., D. P. Chock, P. R. Monson und J. M. Heuss (1977). General Motors sulfate dispersion experiment: Experimental procedures and results. *J. Air Pollut. Control Ass.* 27, 33–38.
- Chan, L. Y., W. L. Lau, S. C. Zou, Z. X. Cao und S. C. Lai (2002). Exposure level of carbon monoxide and respirable suspended particulate in public transportation modes while commuting in urban area of Guangzhou, China. *Atmos. Environ.* 36, 5831–5840.
- Chan, T. L., G. Dong, C. S. Cheung, C. W. Leung, C. P. Wong und W. T. Hung (2001). Monte Carlo simulation of nitrogen oxides dispersion from a vehicular exhaust plume and its sensitivity studies. *Atmos. Environ.* 35, 6117–6127.
- Chang, J. S., R. A. Brost, I. S. Isaksen, S. Madronich, P. Middleton, W. R. Stockwell und C. J. Walcek (1987). A three-dimensional Eulerian acid deposition model: Physical concepts and formulation. *J. Geophys. Res.* 92, 14681–14700.
- Chock, D. P. (1977a). General Motors sulfate dispersion experiment - an overview of the wind, temperature and concentration fields. *Atmos. Environ.* 11, 553–559.
- Chock, D. P. (1977b). General Motors sulfate dispersion experiment: Assessment of the EPA HIWAY model. *J. Air Pollut. Control Ass.* 27, 39–45.
- Chock, D. P. (1978a). An advection-diffusion model for pollutant dispersion near roadways. *J. Appl. Meteor.* 17, 976–989.
- Chock, D. P. (1978b). A simple line-source model for dispersion near roadways. *Atmos. Environ.* 12, 823–829.
- Chock, D. P. (1980). General Motors sulfate dispersion experiment - an analysis of the wind field near a road. *Bound.-Layer Meteor.* 18, 431–451.
- Claiborn, C., A. Mitra, G. Adams, L. Bamesberger, G. Allwine, R. Kantamaneni, B. Lamb und H. Westberg (1995). Evaluation of PM<sub>10</sub> emission rates from paved and unpaved roads using tracer techniques. *Atmos. Environ.* 29, 1075–1089.

- 
- Corsmeier, U., M. Kohler, B. Vogel und F. Fiedler (2002). BAB II: Evaluation of the accuracy of emission data for a motorway. Symposium Eurotrac-2, Garmisch-Partenkirchen.
- Corsmeier, U., M. Kohler, B. Vogel, H. Vogel und F. Fiedler (2003). BAB II: an experiment to evaluate the accuracy of real world emission for a motorway. *Wird eingereicht bei Atmos. Environ.*
- Corsmeier, U. und H. Vogel (1998). *Konzentrationen von Kraftfahrzeugemissionen und Ozon im Nahbereich einer Autobahn*, Band 21 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*. Hrsg.: Beheng, K. D., 96-135.
- Danard, M. (1972). Numerical modeling of carbon monoxide concentrations near highways. *J. Appl. Meteor.* 11, 947–957.
- Deardorff, J. W. (1973). Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. *Bound.-Layer Meteor.* 7, 81–106.
- Degrazia, G. A. (1989). *Anwendung von Ähnlichkeitsverfahren auf die turbulente Diffusion in der konvektiven und stabilen Grenzschicht*, Band 12 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- DeMore, W. B., S. P. Sander, M. J. Molina, D. M. Golden, R. F. Hampson, M. J. Kurlyo, C. J. Howard und A. R. Ravishankar (1988). Chemical kinetics and photochemical data for use in stratospheric modeling. Evaluation No. 8, NASA, Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA.
- Dorwarth, G. (1986). *Numerische Berechnung des Druckwiderstands typischer Geländeformen*, Band 6 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- Düring, I. und A. Lohmeyer (2001). Validierung von PM<sub>10</sub>-Immissionsberechnungen im Nahbereich von Straßen und Quantifizierung der Feinstaubbildung von Straßen. Ingenieurbüro Lohmeyer, Dresden und Karlsruhe, im Auftrag von: Senatverwaltung für Stadtentwicklung, Berlin und Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Dresden.
- Eldering, A. und G. R. Cass (1996). Source-oriented model for air pollutant effects on visibility. *J. Geophys. Res.* 101, 19343–19369.
- Eskridge, R., F. S. Binkowski, J. C. R. Hunt, T. L. Clark und K. L. Demerjian (1979). Highway modeling. Part II: Advection and diffusion of SF<sub>6</sub> tracer gas. *J.*

- Appl. Meteor.* 18, 401–421.
- Eskridge, R. und J. C. R. Hunt (1979). Highway modeling. Part I: Prediction of velocity and turbulence fields in the wake of vehicles. *J. Appl. Meteor.* 18, 387–400.
- Eskridge, R., W. B. Petersen und S. T. Rao (1991). Turbulent diffusion behind vehicles: Effect of traffic speed on pollutant concentrations. *J. Air Waste Manage. Ass.* 41, 312–317.
- Eskridge, R. und S. T. Rao (1983). Measurement and prediction of traffic-induced turbulence and velocity fields near roadways. *J. Climate Appl. Meteor.* 22, 1431–1443.
- Eskridge, R. und S. T. Rao (1986). Turbulent diffusion behind vehicles: Experimentally determined turbulence mixing parameters. *Atmos. Environ.* 20, 851–860.
- Eskridge, R. und R. S. Thompson (1982). Experimental and theoretical study of the wake of a block-shaped vehicle in a shear-free boundary flow. *Atmos. Environ.* 16, 2821–2836.
- Fiedler, F. (1969). Untersuchungen über die Ausbreitung von atmosphärischen Eigenschaften und Luftbeimengungen. *Beitr. Phys. Atmos.* 42, 143–173.
- Fiedler, F. (1972). The effect of baroclinicity on the resistance law in a diabatic Ekman layer. *Beitr. Phys. Atmos.* 45, 164–173.
- Fiedler, F. (1975). Turbulenter Spannungs- und Deformationstensor in der Prandtl-Schicht. *Beitr. Phys. Atmos.* 48, 290–300.
- Fiedler, F. (1982). *Einige Charakteristika der Strömung im Oberrheingraben*, Band 4 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*. Hrsg.: Fiedler, F. und K. Höschele, 113–123.
- Fiedler, F. (1995). *Klimaatlas Oberrhein Mitte-Süd*. Trinationale Verlagsgemeinschaft Regio-Klima-Projekt REKLIP. Offenbach - Strasbourg - Zürich.
- Fiedler, F. (2000). Photosmog und bodennahes Ozon. In: *Promet, Photosmog I*, Vol. 3/4, Jg. 26, Deutscher Wetterdienst, S. 88–89.
- Fiedler, F., I. Bischoff-Gauss, N. Kalthoff und G. Adrian (2000). Modeling of transport and diffusion of a tracer in the Freiburg-Schauinsland area. *J. Geophys. Res.* 105, 1599–1610.

- Fiedler, F., U. Corsmeier, M. Kohler und B. Vogel (2001). Experimentelle Bestimmung der Emissionen des Kraftfahrzeugverkehrs auf Autobahnen und Vergleich mit berechneten Emissionen. BAB II -Operationsplan. Interner Bericht des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung, Universität (TH) / Forschungszentrum Karlsruhe.
- Fiedler, F. und R. Friedrich (2001). Erforderliche Komponenten für die Ozonmodellierung. In: *Promet, Photosmog II*, Vol. 1/2, Jg. 27, Deutscher Wetterdienst, S. 1-5.
- Fraigneau, Y., M. Gonzalez und A. Coppalle (1996). The influence of turbulence upon the chemical reaction of nitric oxide released from a ground source into ambient ozone. *Atmos. Environ.* 30, 1467–1480.
- Galmarini, S., J. V.-G. D. Arellano und P. G. Duynkerke (1995). The effect of micro-scale turbulence on the reaction rate in a chemically reactive plume. *Atmos. Environ.* 29, 87–95.
- Gillies, J. A., A. W. Gertler, J. C. Sagebiel und W. A. Dippel (2001). On-road particulate matter PM<sub>2.5</sub> and PM<sub>10</sub> emissions in the Sepulveda Tunnel, Los Angeles, California. *Environ. Sci. Technol.* 35, 1054–1063.
- Grønskei, K. E. (1988). The influence of car speed on dispersion of exhaust gases. *Atmos. Environ.* 22, 273–281.
- Gross, G. (1997). ASMUS - Ein numerisches Modell zur Berechnung der Strömung und der Schadstoffverteilung im Bereich einzelner Gebäude. II: Schadstoffausbreitung und Anwendung. *Meteorolog. Zeitschrift* 6, 130–136.
- Hamilton, R. S. und R. M. Harrison (1991). *Highway Pollution*, Band 44 d. Reihe *Studies in Environmental Science*. Elsevier.
- Hammer, M. (2001). *Photochemische Indikatoren zur Charakterisierung der Oxidantienbildung bei Hochdruckwetterlagen*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).
- Harrison, R. M., J. Yin, D. Mark, J. Stedman, R. S. Appleby, J. Booker und S. Moorcroft (2001). Studies of coarse particle (2.5-10  $\mu\text{m}$ ) component in UK urban atmospheres. *Atmos. Environ.* 35, 3667–3679.
- Hass, H. (1991). Description of the EURAD chemistry-transport-model version 2. Mitteilungen aus dem Institut für Geophysik und Meteorologie. Heft 83. Universität Köln.

- Hay, J. S. und F. Pasquill (1959). Diffusion from a continuous source in relation to the spectrum and scale of turbulence. *Adv. Geophys.* 6, 345–365.
- Heldt, K. (1991). *Untersuchungen zur Überströmung eines mikroskaligen Hindernisses in der Atmosphäre*, Band 14 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- Henne, S. (2001). Untersuchungen zum Einfluss fahrzeugerzeugter Turbulenz auf das Ausbreitungsverhalten von Luftschadstoffen in Straßenschluchten. Diplomarbeit, Meteorologisches Institut, Universität Hamburg.
- Hitchins, J., L. Morawska, R. Wolff und D. Gilbert (2000). Concentrations of submicrometre particles from vehicle emissions near a major road. *Atmos. Environ.* 34, 51–59.
- Hugelmann, C. P. (1988). *Differenzenverfahren zur Behandlung der Advektion*, Band 8 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- Hüglin, C. und R. Gehrig (2000). Anteil des Straßenverkehrs an den PM<sub>10</sub>- und PM<sub>2.5</sub>-Immisionen. Chemische Zusammensetzung des Feinstaubes und Quellenzuordnung mit einem Rezeptormodell. EMPA, Dübendorf, Schweiz.
- Imhof, D., E. Weingartner, U. Baltensberger, U. Corsmeier, M. Kohler, F. Fiedler, U. Vogt, A. Dreiseidler, G. Baumbach, E. Rosenbohm, V. Scheer, R. Vogt und O. J. Nielsen (2002). Vertical distribution of aerosol particles close to a motorway. In: P. Sturm und S. Minarik (Hrsg.), *11th International Symposium: Transport and Air Pollution*, Band 81, S. 317–322. Technische Universität Graz: R. Pischinger.
- Jaecker-Voirol, A. und P. Pelt (2000). PM<sub>10</sub> emission inventory in Ile de France for transport and industrial sources: PM<sub>10</sub> re-suspension, a key factor for air quality. *Environ. Modell. Softw.* 15, 575–581.
- Kalthoff, N., D. Bäumer, U. Corsmeier, M. Kohler, B. Vogel und F. Fiedler (2003). Vehicle-induced turbulence on a motorway. *Wird eingereicht bei Atmos. Environ.*
- Kalthoff, N. und B. Vogel (1992). Counter-current and channeling effect under stable stratification in the area of Karlsruhe. *Theor. Appl. Climatol.* 45, 113–126.
- Kantamaneni, R., G. Adams, L. Bamesberger, G. Allwine, H. Westberg, B. Lamb und C. Claiborn (1996). The measurement of PM<sub>10</sub> emission rates using tracer ratio techniques. *Atmos. Environ.* 30, 4209–4223.



- 
- Karim, M. M. und H. Matsui (1998). A mathematical model of wind flow, vehicle wake, and pollutant concentration in urban road microenvironments. Part I: Model description. *Transport. Res.-D* 3, 81–92.
- Karim, M. M., H. Matsui und R. Guensler (1998). A mathematical model of wind flow, vehicle wake, and pollutant concentration in urban road microenvironments. Part II: Model results. *Transport. Res.-D* 3, 171–191.
- Kastner-Klein, P., R. Berkowicz und E. J. Plate (2000). Modelling of vehicle induced turbulence in air pollution studies for streets. *Int. J. Environ. Pollut.* 14, 496–507.
- Keil, C. (1996). Behandlung einer Punktquelle in der numerischen Ausbreitungsrechnung. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).
- Kim, D.-H., M. Gautam und D. Gera (2001). On the prediction of concentration variations in a dispersing heavy-duty truck exhaust plume using  $k - \varepsilon$  turbulent closure. *Atmos. Environ.* 35, 5267–5275.
- Kleeman, M. J. und G. R. Cass (1998). Source contributions to the size and composition distribution of urban particulate air pollution. *Atmos. Environ.* 32, 2803–2816.
- Kofoed-Hansen, O. (1967). On the relation between Eulerian and Lagrangian averages in the statistical theory of turbulence. Risø Report No. 50, Danish Atomic Energy Commission.
- Kottmeier, C. (1982). Die Vertikalstruktur nächtlicher Grenzschichtstrahlströme. Dissertation, Inst. f. Meteorologie und Klimatologie, Univ. Hannover.
- Kühlwein, J. und R. Friedrich (2002). Endbericht zur Durchführung eines Teilvorhabens: Verkehrsmessungen, Emissionsmodellierungen und Datenauswertung. im Rahmen des vom Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe (TH)/ Forschungszentrum Karlsruhe, durchgeführten Forschungsvorhabens: Emissionsnahe Überprüfung KFZ-bedingter Immisionen. Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung, Universität Stuttgart.
- Kühlwein, J., C. John, A. Obermeier und R. Friedrich (1998). Experimentelle Überprüfung der Genauigkeit von Emissionsdaten für den Kraftfahrzeugverkehr auf Autobahnen - Auslegung und Durchführung eines Vorexperiments. Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung, Universität Stuttgart.
- Kuhns, H., V. Etyemezian, D. Landwehr, C. MacDougall, M. Pitchford und M. Green (2001). Testing Re-entrained Aerosol Kinetic Emissions from Roads (TRAKER):

- A new approach to infer silt loading on roadways. *Atmos. Environ.* 35, 2815–2825.
- Kukkonen, J., J. Härkönen, A. Karppinen, M. Pohjola, H. Pietarila und T. Koskentalo (2001). A semi-empirical model for urban PM<sub>10</sub> concentrations, and its evaluation against data from an urban measurement network. *Atmos. Environ.* 35, 4433–4442.
- Kumar, A. V., R. S. Patil und K. S. V. Nambi (2001). Source apportionment of suspended particulate matter at two traffic junctions in Mumbai, India. *Atmos. Environ.* 35, 4245–4251.
- Legret, M. und C. Pagotto (1999). Evaluation of pollutant loadings in the runoff waters from a major rural highway. *Sci. Total Environ.* 235, 143–150.
- Lenschow, P., H.-J. Abraham, K. Kutzer, M. Lutz, J.-D. Preuß und W. Reichenbacher (2001). Some ideas about the sources of PM<sub>10</sub>. *Atmos. Environ.* 35, S23–S33.
- Lettau, H. (1939). *Atmosphärische Turbulenz*. Akademische Verlagsgesellschaft Leipzig.
- Ley, A. und D. J. Thomson (1983). A random walk model of dispersion in the diabatic surface layer. *Quart. J. R. Met. Soc.* 109, 847–880.
- Lükewille, A., I. Bertok, M. Amann, J. Cofala, F. Györfas, C. Heyes, N. Karvosenoja, Z. Klimont und W. Schöpp (2001). A Framework to Estimate the Potential and Costs for the Control of Fine Particulate Emissions in Europe. Interim Report IR-01-023, International Institute for Applied System Analysis, Laxenburg, Österreich.
- Manoli, E., D. Voutsas und C. Samara (2002). Chemical characterization and source identification / apportionment of fine and coarse particles in Thessaloniki, Greece. *Atmos. Environ.* 36, 949–961.
- Martonen, T. B., Z. Zhang und G. Y. an C. J. Musante (2002). 3-D Particle transport within the human upper respiratory tract. *J. Aerosol Sci.* 33, 1095–1110.
- Maynard, A. D. und R. L. Maynard (2002). A derived association between ambient aerosol surface area and excess mortality using historic time series data. *Atmos. Environ.* 36, 5561–5567.
- Meeder, J. P. und F. T. M. Nieuwstadt (2000). Large-eddy simulation of the turbulent dispersion of a reactive plume from a point source into a neutral atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.* 34, 3563–3573.

- 
- Mollinger, A. M., F. T. M. Nieuwstadt und B. Scarlett (1993). Model experiments of the resuspension caused by road traffic. *Aerosol Sci. Tech.* 19, 330–338.
- Moosmüller, H., J. A. Gillies, C. F. Rogers, D. W. DuBois, J. C. Chow, J. G. Watson und R. Langston (1998). Particulate emission rates for unpaved shoulders along a paved road. *J. Air Waste Manage. Ass.* 48, 398–407.
- Namdeo, A. K., J. J. Colls und C. J. Baker (1999). Dispersion and re-suspension of fine and coarse particulates in an urban street canyon. *Sci. Total Environ.* 235, 3–13.
- Nester, K. (1995). Influence of sea breeze flows on air pollution over the Attica peninsula. *Atmos. Environ.* 29, 3655–3670.
- Nester, K., M. Bär und F. Fiedler (1987). Modellierung des Ferntransports von Luftschadstoffen für eine TULLA-Episode. Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK-PEF, 12, 397–407.
- Nicholson, K., J. R. Branson, P. Giess, R. J. und Cannell (1989). The effects of vehicle activity on particle resuspension. *J. Aerosol Sci.* 20, 1425–1428.
- Nickovic, S. und S. Dobricic (1996). A model for long-range transport of desert dust. *Mon. Weather Rev.* 124, 2537–2544.
- Nickovic, S., G. Kallos, A. Papadopoulos und O. Kakaliagou (2001). A model for prediction of desert dust cycle in the atmosphere. *J. Geophys. Res.* D16, 18113–18129.
- Ntziachristos, L. und Z. Samaras (2001). An empirical method for predicting exhaust emissions of regulated pollutants from future vehicle technologies. *Atmos. Environ.* 35, 1985–1999.
- Obermeier, A., R. Friedrich, C. John und J. Seier (1997). Simulation und Bewertung von Emissionsminderungsmaßnahmen für Ozonvorläufersubstanzen im südlichen Oberrheingraben. In: Ozonproblematik im südlichen Oberrheingraben: Emissionen, Minderungsszenarien und Immissionen. FZKA-PEF 162, pp. 1–53.
- Pakkanen, T. A., V.-M. Kerminen, C. H. Korhonen, R. E. Hillamo, P. Aarnio, T. Koskentalo und W. Maenhaut (2001). Use of atmospheric elemental size distributions in estimating aerosol sources in the Helsinki area. *Atmos. Environ.* 35, 5537–5551.
- Pasquill, F. und F. B. Smith (1983). *Atmospheric Diffusion*. Ellis Horwood Limited. Chichester, England.

- Pope, C. A., R. T. Burnett, M. J. Thun, E. E. Calle, D. Krewski, K. Ito und G. D. Thurston (2002). Lung cancer, cardiopulmonary mortality, and long-term exposure to fine particulate air pollution. *J. Amer. Med. Assoc.* 287, 1132–1141.
- Pregger, T. und R. Friedrich (2002). Ermittlung der Feinstaubemissionen in Baden-Württemberg und Betrachtung möglicher Minderungsmaßnahmen. Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung, Universität Stuttgart, Zwischenbericht für Statusseminar des BWPLUS im Februar 2002, Forschungszentrum Karlsruhe.
- Prenosil, T. (1980). Anwendungen eines numerischen Modells für die Überströmung mesoskaliger Geländeformen. *Ann. Meteor.* 16, 106–108.
- Puxbaum, H., P. J. Sturm, H. Schmid, H. Bauer, M. Bacher, P. Biebl und E. Pucher (2002). Non-exhaust related particulate emission rates from roadway traffic - derived from a European tunnel study. In: P. Sturm und S. Minarik (Hrsg.), *11th International Symposium: Transport and Air Pollution*, Band 81, S. 385–391. Technische Universität Graz: R. Pischinger.
- Rao, K. S., R. L. Gunter, J. R. White und R. P. Hosker (2002). Turbulence and dispersion modeling near highways. *Atmos. Environ.* 36, 4337–4346.
- Rao, S. T. und M. T. Keenan (1980). Suggestions for improvement of the EPA-HIWAY model. *J. Air Pollut. Control Ass.* 30, 247–256.
- Rao, S. T., L. Sedefian und U. H. Czapski (1979). Characteristics of turbulence and dispersion of pollutants near major highways. *J. Appl. Meteor.* 18, 283–293.
- Rao, S. T., G. Sistla, R. E. Eskridge und W. B. Petersen (1986). Turbulent diffusion behind vehicles: Evaluation of roadway models. *Atmos. Environ.* 20, 1095–1103.
- Rao, S. T., G. Sistla, M. T. Keenan und J. S. Wilson (1980). An evaluation of some commonly used highway dispersion models. *J. Air Pollut. Control Ass.* 30, 239–246.
- Rauterberg-Wulff, A. (1998). Beitrag des Reifen- und Bremsenabriebs zur Rußemission an Straßen. Fortschr.-Ber. VDI Reihe 15 Nr. 202. VDI Verlag Düsseldorf.
- Riemer, N. (1997). NO<sub>y</sub> als Indikator für den photochemischen Zustand der Atmosphäre - Sensitivitätsuntersuchungen mittels numerischer Simulationen. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).
- Riemer, N. (2002). *Numerische Simulationen zur Wirkung des Aerosols auf die troposphärische Chemie und die Sichtweite*, Band 29 d. Reihe Wissenschaftli-

- 
- che Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).*
- Ruellan, S. und H. Cachier (2001). Characterisation of fresh particulate vehicular exhausts near a Paris high flow road. *Atmos. Environ.* 35, 453–468.
- Salma, I., M. D. Maso, M. Kulmala und G. Zaray (2002). Modal characteristics of particulate matter in urban atmospheric aerosols. *Microchem. J.* 73, 19–26.
- Schädler, G. (1990). *Numerische Simulationen zur Wechselwirkung zwischen Landoberflächen und atmosphärischer Grenzschicht*, Band 13 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- Schäfer, J., J.-D. Eckhardt, Z. A. Berner und D. Stüben (1999). Time-dependent increase of traffic emitted Platinum-Group Elements (PGE) in different environmental departments. *Environ. Sci. Technol.* 33, 3166–3170.
- Schatzmann, M., B. Leitl und J. Liedtke (1999). Ausbreitung von KFZ-Abgasen in Straßenschluchten. Forschungsbericht FZKA-BWPLUS, Förderkennzeichen: PEF 2 96001.
- Schultz, E. (1994a). Messung und Bewertung verkehrsbedingter Grobstaubemissionen. *Meteorolog. Zeitschrift* 3, 143–146.
- Schultz, E. (1994b). Size fractionated determination of black carbon particles in airborne dust originating from traffic. *Sci. Total Environ.* 146/147, 289–296.
- Schwartz, A. (1992). Ausbreitung und Deposition von Autoabgasen dargestellt anhand von numerischen Simulationen. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).
- Schwartz, A. (1996). *Numerische Simulationen zur Massenbilanz chemisch reaktiver Substanzen im mesoskaligen Bereich*, Band 20 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- Sehmel, G. A. (1973). Particle resuspension from an asphalt road caused by car and truck traffic. *Atmos. Environ.* 7, 291–309.
- Seinfeld, J. H. und S. N. Pandis (1998). *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. John Wiley & Sons, New York.
- Sternbeck, J., A. Sjödin und K. Andreasson (2002). Metal emissions from road traffic and the influence of resuspension - results from two tunnel studies. *Atmos.*

- Environ.* 36, 4735–4744.
- Stockwell, W. R., P. Middleton, J. S. Chang und X. Tang (1990). The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. *J. Geophys. Res.* 95, 16343–16367.
- Stull, R. B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Niederlande.
- Sweby, P. K. (1984). High resolution TVD schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.* 21, 995–1011.
- Tangermann Dlugi, G. (1982). *Numerische Simulationen atmosphärischer Grenzschichtströmungen über langgestreckten mesoskaligen Hügelketten bei neutraler thermischer Schichtung*, Band 2 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- Tangermann-Dlugi, G. und F. Fiedler (1983). Numerische Simulationen turbulenter Ausbreitungsvorgänge in der atmosphärischen Grenzschicht. *Wasserwirtschaft* 73, 411–415.
- Taylor, G. I. (1921). Diffusion by continuous movements. *Proc. London Math. Soc.* 20, 196–212.
- Taylor, G. I. (1938). The spectrum of turbulence. *Proc. Roy. Soc. A* 164, 476.
- Thomson, D. (1995). Discussion - The parameterization of the vertical dispersion of a scalar in the atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.* 29, 1343.
- Tiitta, P., T. Raunemaa, J. Tissari, T. Yli-Tuomi, A. Leskinen, J. Kukkonen, J. Härkönen und A. Karppinen (2002). Measurements and modelling of PM<sub>2.5</sub> concentrations near a major road in Kuopio, Finland. *Atmos. Environ.* 36, 4057–4068.
- UMEG (2001). Entwicklung von Fahrleistung und Emissionen auf den Autobahnen in Baden-Württemberg. Gesellschaft für Umweltmessungen, Umwelterhebungen und Gerätesicherheit, Karlsruhe.
- U.S. EPA (1997). Environmental Protection Agency, Compilation of Air Pollutant Emission Factors AP-42, Section Miscellaneous Sources.
- van Dop, H. (1998). Discussion - The parameterization of the vertical dispersion of a scalar in the atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.* 32, 257–258.
- Venkatram, A. (1993). The parameterization of the vertical dispersion of a scalar in the atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.* 27A, 1963–1966.

- 
- Venkatram, A. (2000). A critique of empirical emission factor models: a case study of the AP-42 model for estimating PM<sub>10</sub> emissions from paved roads. *Atmos. Environ.* 34, 1–11.
- Venkatram, A., D. Fitz, K. Bumiller, S. Du, M. Boeck und C. Ganguly (1999). Using a dispersion model to estimate emission rates of particulate matter from paved roads. *Atmos. Environ.* 33, 1093–1102.
- Vesovic, V., A. Auziere, G. Calviac und A. Dauriat (2001). Modelling of the dispersion and deposition of coarse particulate matter under neutral atmospheric conditions. *Atmos. Environ.* 35, S99–S105.
- Vogel, B., U. Corsmeier, H. Vogel, F. Fiedler, J. Kühlwein, R. Friedrich, A. Obermeier, J. Weppner, N. Kalthoff, D. Bäumer, A. Bitzer und K. Jay (2000). Comparison of measured and calculated motorway emission data. *Atmos. Environ.* 34, 2437–2450.
- Vogel, B. und S. Emeis (1990). Ein Vergleich verschiedener Schließungsverfahren 1. Ordnung unter Verwendung eines eindimensionalen Grenzschichtmodells und Daten des Wangara-Experimentes. Interner Bericht des Kernforschungszentrums Karlsruhe.
- Vogel, B., F. Fiedler und H. Vogel (1995). The influence of topography and biogenic VOC emissions in the state of Baden-Württemberg on the ozone concentrations during episodes of high air temperatures. *J. Geophys. Res.* 100, 22907–22928.
- Vogel, B., H. Vogel, J. Kleffmann und R. Kurtenbach (2002). Measured and simulated vertical profiles of nitrous acid, Part II - Model simulations and indications for a photolytic source. *Eingereicht bei Atmos. Environ.*
- Vogel, H. (1991). *Verteilungen reaktiver Luftbeimengungen im Lee einer Stadt - Numerische Untersuchung der relevanten Prozesse*, Band 15 d. Reihe *Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH)*.
- Vogel, H., F. Fiedler und B. Vogel (1997). Regionalanalyse sommerlicher Photosmogepisoden anhand von Meßwerten und numerischen Modellrechnungen. In: *Ozonproblematik im südlichen Oberrheingraben: Emissionen, Minderungszenarien und Immissionen*. FZKA-PEF 162, pp. 54–112.
- Warner, L. R., R. S. Sokhi, L. Luhana, P. G. Boulter und I. McCrae (2002). Non-exhaust particle emissions from road transport. In: P. Sturm und S. Minarik

- (Hrsg.), *11th International Symposium: Transport and Air Pollution*, Band 81, S. 265–272. Technische Universität Graz: R. Pischinger.
- Weckwerth, G. (2001). Verification of traffic emitted aerosol components in the ambient air of Cologne (Germany). *Atmos. Environ.* 35, 5525–5536.
- Weiß, C. (2002). Untersuchungen zur autobahninduzierten Turbulenz. Seminararbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH).
- Wilson, L., L. Spiller, T. G. Ellestad, P. J. Lamothe, T. G. Dzubay, R. K. Stevens, E. S. Macias, R. A. Fletcher, J. D. Husar, R. B. Husar, K. T. Whitby, D. B. Kittelson und B. K. Cantrell (1977). General Motors sulfate dispersion experiment: Summary of EPA measurements. *J. Air Pollut. Control Ass.* 27, 46–51.
- Yanenko, N. N. (1971). *The Method of Fractional Steps*. Springer-Verlag, New York.
- Zimmermann, J. R. und R. S. Thompson (1975). User's Guide For HIWAY. A highway air pollution model. EPA-650/4-74-008.



# A Anhang

## A.1 Liste der Substanzen in RADM2

**Tabelle A.1:** Substanzen, für die in RADM2 eine prognostische Gleichung gelöst wird. Substanzklassen sind mit einem „★“ gekennzeichnet.

Substanz	Symbol	Summenformel	emittiert
Schwefeldioxid	SO2	$SO_2$	X
Schwefelsäure	SULF	$H_2SO_4$	
Stickstoffmonoxid	NO	$NO$	X
Stickstoffdioxid	NO2	$NO_2$	X
Nitratradikal	NO3	$NO_3$	
Stickstoffpentoxid	N2O5	$N_2O_5$	
Salpetersäure	HNO3	$HNO_3$	
salpetrige Säure	HONO	$HNO_2$	
Peroxisalpetersäure	HNO4	$HNO_4$	
Peroxiacetylnitrat	PAN	$CH_3C(O)O_2NO_2$	
TPAN	TPAN	$CH_3C(O)O_2NO_2$	
Peroxiacetylradikal	ACO3	$CH_3C(O)O_2$	
andere organische Nitrate	ONIT ★	$R - ONO_2$	
Ozon	O3	$O_3$	
Wasserstoffperoxid	H2O2	$H_2O_2$	
Kohlenmonoxid	CO	$CO$	X
Formaldehyd	HCHO	$HCHO$	X
Aldehyde ( $n \geq 1$ )	ALD ★	$C_nH_{2n+1}CHO$	X
Ketone	KET ★	$CH_3COCH_3$ , u.a.	X
Glyoxal	GLY	$OHC - CHO$	

Substanz	Symbol	Summenformel	emittiert
Methylglyoxal	MGLY	$CH_3COCHO$	
andere Dicarbonyl	DCB ★	$R - (CHO)_2$	
Ameisensäure	ORA1	$HCOOH$	
Essigsäure	ORA2	$CH_3COOH$	
Methylhydrogenper.	OP1	$CH_3OOH$	
organische Peroxide	OP2 ★	$RO_2H$	
Peroxiacetylsäure	PAA	$CH_3(CO)OOH$	
Ethan	ETH	$C_2H_6$	X
C3-C5 Alkane	HC3 ★	$C_3H_8$ , u.a.	X
C6-C8 Alkane	HC5 ★	$C_7H_{16}$ , u.a.	X
andere Alkane ( $n \geq 10$ )	HC8	$C_nH_{2n+2}$ , u.a.	X
Ethen	OL2	$C_2H_4$	X
Propen u.a.	OLT ★	$C_3H_6$ , u.a.	X
Buten u.a.	OLI ★	$C_4H_8$ , u.a.	X
Isopren	ISO	$C_5H_8$	
Toluol, Benzol u.a.	TOL ★	$C_6H_5CH_3$ , u.a.	X
Kresole u.a.	CSL ★	$HOC_6H_4CH_3$ , u.a.	X
Xylol u.a.	XYL ★	$C_6H_4(CH_3)_2$ , u.a.	X

## A.2 Liste der Reaktionen

### A.2.1 Photolysereaktionen

**Tabelle A.2:** *Photolysereaktionen in RADM2*

1	$NO_2 + h\nu$	$\longrightarrow$	$O(^3P) + NO$
2	$O_3 + h\nu$	$\longrightarrow$	$O(^1D) + O_2$
3	$O_3 + h\nu$	$\longrightarrow$	$O(^3P) + O_2$
4	$HONO + h\nu$	$\longrightarrow$	$OH + NO$
5	$HNO_3 + h\nu$	$\longrightarrow$	$OH + NO_2$
6	$HNO_4 + h\nu$	$\longrightarrow$	$HO_2 + NO_2$
7	$NO_3 + h\nu$	$\longrightarrow$	$NO + O_2$
8	$NO_3 + h\nu$	$\longrightarrow$	$NO_2 + O(^3P)$
9	$H_2O_2 + h\nu$	$\longrightarrow$	$OH + OH$
10	$HCHO + h\nu$	$\longrightarrow$	$H_2 + CO$
11	$HCHO + h\nu$	$\longrightarrow$	$HO_2 + HO_2 + CO$
12	$ALD + h\nu$	$\longrightarrow$	$MO_2 + HO_2 + CO$
13	$OP1 + h\nu$	$\longrightarrow$	$HCHO + HO_2 + OH$
14	$OP2 + h\nu$	$\longrightarrow$	$ALD + HO_2 + OH$
15	$PAA + h\nu$	$\longrightarrow$	$MO_2 + CO_2 + OH$
16	$KET + h\nu$	$\longrightarrow$	$ACO_3 + ETHP$
17	$GLY + h\nu$	$\longrightarrow$	$0.13HCHO + 1.87CO$
18	$GLY + h\nu$	$\longrightarrow$	$0.45HCHO + 1.55CO + 0.8HO_2$
19	$MGLY + h\nu$	$\longrightarrow$	$ACO_3 + HO_2 + CO$
20	$DCB + h\nu$	$\longrightarrow$	$0.98HO_2 + 0.02ACO_3 + TCO_3$
21	$ONIT + h\nu$	$\longrightarrow$	$0.2ALD + 0.80KET + HO_2 + NO_2$

## A.2.2 Thermische Reaktionen

**Tabelle A.3:** *Thermische Reaktionen in RADM2*

1	$O(^3P) + O_2$	$\longrightarrow$	$O_3$
2	$O(^3P) + NO_2$	$\longrightarrow$	$NO + O_2$
3	$O(^1D) + N_2$	$\longrightarrow$	$O(^3P) + N_2$
4	$O(^1D) + O_2$	$\longrightarrow$	$O(^3P) + O_2$
5	$O(^1D) + H_2O$	$\longrightarrow$	$OH + OH$
6	$O_3 + NO$	$\longrightarrow$	$NO_2 + O_2$
7	$O_3 + OH$	$\longrightarrow$	$HO_2 + O_2$
8	$O_3 + HO_2$	$\longrightarrow$	$OH + 2O_2$
9	$HO_2 + NO$	$\longrightarrow$	$NO_2 + OH$
10	$HO_2 + NO_2$	$\longrightarrow$	$HNO_4$
11	$HNO_4$	$\longrightarrow$	$HO_2 + NO_2$
12	$HO_2 + HO_2$	$\longrightarrow$	$H_2O_2$
13	$HO_2 + HO_2 + H_2O$	$\longrightarrow$	$H_2O_2$
14	$H_2O_2 + OH$	$\longrightarrow$	$HO_2 + H_2O$
15	$NO + OH$	$\longrightarrow$	$HONO$
16	$NO + NO + O_2$	$\longrightarrow$	$NO_2 + NO_2$
17	$O_3 + NO_2$	$\longrightarrow$	$NO_3$
18	$NO_3 + NO$	$\longrightarrow$	$NO_2 + NO_2$
19	$NO_3 + NO_2$	$\longrightarrow$	$NO + NO_2 + O_2$
20	$NO_3 + HO_2$	$\longrightarrow$	$HNO_3 + O_2$
21	$NO_3 + NO_2$	$\longrightarrow$	$N_2O_5$
22	$N_2O_5$	$\longrightarrow$	$NO_3 + NO_2$
23	$N_2O_5 + H_2O$	$\longrightarrow$	$2HNO_3$
24	$OH + NO_2$	$\longrightarrow$	$HNO_3$
25	$OH + HNO_3$	$\longrightarrow$	$NO_3 + H_2O$
26	$OH + HNO_4$	$\longrightarrow$	$NO_2 + H_2O + O_2$
27	$OH + HO_2$	$\longrightarrow$	$H_2O + O_2$
28	$OH + SO_2$	$\longrightarrow$	$SULF + HO_2$
29	$CO + OH$	$\longrightarrow$	$HO_2 + CO_2$
30	$CH_4 + OH$	$\longrightarrow$	$MO_2 + H_2O$
31	$ETH + OH$	$\longrightarrow$	$ETHP + H_2O$
32	$HC3 + OH$	$\longrightarrow$	$.83HC3P + .17HO_2 + .09HCHO$ $+ .075ALD + .025KET + H_2O$
33	$HC5 + OH$	$\longrightarrow$	$HC5P + 0.25XO_2 + H_2O$
34	$HC8 + OH$	$\longrightarrow$	$HC8P + 0.75XO_2 + H_2O$
35	$OL2 + OH$	$\longrightarrow$	$OL2P$
36	$OLT + OH$	$\longrightarrow$	$OLT P$
37	$OLI + OH$	$\longrightarrow$	$OLIP$
38	$TOL + OH$	$\longrightarrow$	$.75TOLP + .25CSL + .25HO_2$
39	$XYL + OH$	$\longrightarrow$	$.83XYLP + .17CSL + .17HO_2$
40	$CSL + OH$	$\longrightarrow$	$.1HO_2 + .9XO_2 + .9TCO_3 - .9OH$
41	$HCHO + OH$	$\longrightarrow$	$HO_2 + CO + H_2O$
42	$ALD + OH$	$\longrightarrow$	$ACO_3 + H_2O$
43	$KET + OH$	$\longrightarrow$	$KETP + H_2O$
44	$GLY + OH$	$\longrightarrow$	$HO_2 + 2CO + H_2O$
45	$MGLY + OH$	$\longrightarrow$	$ACO_3 + CO + H_2O$
46	$DCB + OH$	$\longrightarrow$	$TCO_3 + H_2O$
47	$OP1 + OH$	$\longrightarrow$	$.5MO_2 + .5HCHO + .5OH$
48	$OP2 + OH$	$\longrightarrow$	$.5HC3P + .5ALD + .5OH$

49	$PAA + OH$	$\longrightarrow$	$ACO_3 + H_2O$
50	$PAN + OH$	$\longrightarrow$	$HCHO + NO_3 + XO_2$
51	$ONIT + OH$	$\longrightarrow$	$HC3P + NO_2$
52	$ISO + OH$	$\longrightarrow$	$OLTP$
53	$ACO_3 + NO_2$	$\longrightarrow$	$PAN$
54	$PAN$	$\longrightarrow$	$ACO_3 + NO_2$
55	$TCO_3 + NO_2$	$\longrightarrow$	$TPAN$
56	$TPAN$	$\longrightarrow$	$TCO_3 + NO_2$
57	$MO_2 + NO$	$\longrightarrow$	$HCHO + HO_2 + NO_2$
58	$HC3P + NO$	$\longrightarrow$	$.75ALD + .25KET + .09HCHO +$ $.36ONIT + .96NO_2 + .96HO_2$
60	$HC5P + NO$	$\longrightarrow$	$.38ALD + .69KET + .08ONIT +$ $.92NO_2 + .92HO_2$
62	$HC8P + NO$	$\longrightarrow$	$.35ALD + 1.06KET + .04HCHO +$ $.24ONIT + .76NO_2 + .76HO_2$
64	$OLP_2 + NO$	$\longrightarrow$	$1.6HCHO + HO_2 + NO_2 + .2ALD$
65	$OLTP + NO$	$\longrightarrow$	$ALD + HCHO + HO_2 + NO_2$
66	$OLIP + NO$	$\longrightarrow$	$1.45ALD + .28HCHO + HO_2 + NO_2 + .1KET$
67	$ACO_3 + NO$	$\longrightarrow$	$MO_2 + NO_2$
68	$TCO_3 + NO$	$\longrightarrow$	$NO_2 + .92HO_2 + .89GLY + .11MGLY +$ $.05ACO_3 + .95CO + 2XO_2$
69	$TOLP + NO$	$\longrightarrow$	$NO_2 + HO_2 + .16GLY + .17MGLY + .7DCB$
70	$XYLP + NO$	$\longrightarrow$	$NO_2 + HO_2 + .45MGLY + .806DCB$
71	$ETHP + NO$	$\longrightarrow$	$ALD + NO_2 + HO_2$
72	$KETP + NO$	$\longrightarrow$	$MGLY + NO_2 + HO_2$
73	$OLN + NO$	$\longrightarrow$	$HCHO + ALD + 2NO_2$
74	$HCHO + NO_3$	$\longrightarrow$	$HO_2 + HNO_3 + CO$
75	$ALD + NO_3$	$\longrightarrow$	$ACO_3 + HNO_3$
76	$GLY + NO_3$	$\longrightarrow$	$HNO_3 + HO_2 + 2CO$
77	$MGLY + NO_3$	$\longrightarrow$	$HNO_3 + ACO_3 + CO$
78	$DCB + NO_3$	$\longrightarrow$	$HNO_3 + TCO_3$
79	$CSL + NO_3$	$\longrightarrow$	$HNO_3 + XNO_2 + 0.5CSL$
80	$OL_2 + NO_3$	$\longrightarrow$	$OLN$
81	$OLT + NO_3$	$\longrightarrow$	$OLN$
82	$OLI + NO_3$	$\longrightarrow$	$OLN$
83	$ISO + NO_3$	$\longrightarrow$	$OLN$
84	$OL_2 + O_3$	$\longrightarrow$	$HCHO + .42CO + .4ORA1 + .12HO_2$
85	$OLT + O_3$	$\longrightarrow$	$.53HCHO + .5ALD + .33CO + .2ORA1 +$ $.2ORA2 + .23HO_2 + .22MO_2 + .1OH + .06CH_4$
86	$OLI + O_3$	$\longrightarrow$	$.18HCHO + .72ALD + .1KET + .23CO +$ $.06ORA1 + .29ORA2 + .26HO_2 +$ $.31MO_2 + .14OH + .09CH_4$
87	$ISO + O_3$	$\longrightarrow$	$.53HCHO + .5ALD + .33CO +$ $.2ORA1 + .2ORA + .23HO_2 + .22MO_2 + .1OH$
88	$HO_2 + MO_2$	$\longrightarrow$	$OP1$
89	$HO_2 + ETHP$	$\longrightarrow$	$OP2$
90	$HO_2 + HC3P$	$\longrightarrow$	$OP2$
91	$HO_2 + HC5P$	$\longrightarrow$	$OP2$
92	$HO_2 + HC8P$	$\longrightarrow$	$OP2$
93	$HO_2 + OL_2P$	$\longrightarrow$	$OP2$
94	$HO_2 + OLTP$	$\longrightarrow$	$OP2$
95	$HO_2 + OLIP$	$\longrightarrow$	$OP2$
96	$HO_2 + KETP$	$\longrightarrow$	$OP2$
97	$HO_2 + ACO_3$	$\longrightarrow$	$PAA$

---

98	$HO_2 + TOLP$	$\longrightarrow$	$OP2$
99	$HO_2 + XYLP$	$\longrightarrow$	$OP2$
100	$HO_2 + TCO_3$	$\longrightarrow$	$OP2$
101	$HO_2 + OLN$	$\longrightarrow$	$ONIT$
102	$MO_2 + MO_2$	$\longrightarrow$	$1.5HCHO + HO_2$
103	$MO_2 + ETHP$	$\longrightarrow$	$.75HCHO + HO_2 + .75ALD$
104	$MO_2 + HC3P$	$\longrightarrow$	$.84HCHO + HO_2 + .77ALD + .26KET$
105	$MO_2 + HC5P$	$\longrightarrow$	$.77HCHO + HO_2 + .41ALD + .75KET$
106	$MO_2 + HC8P$	$\longrightarrow$	$.8HCHO + HO_2 + .46ALD + 1.39KET$
107	$MO_2 + OL2P$	$\longrightarrow$	$1.55HCHO + HO_2 + .35ALD$
108	$MO_2 + OLTP$	$\longrightarrow$	$1.25HCHO + HO_2 + .75ALD$
109	$MO_2 + OLIP$	$\longrightarrow$	$.89HCHO + HO_2 + .73ALD + .55KET$
110	$MO_2 + KETP$	$\longrightarrow$	$.75HCHO + HO_2 + .75MGLY$
111	$MO_2 + ACO_3$	$\longrightarrow$	$HCHO + .5HO_2 + .5MO_2 + .5ORA2$
112	$MO_2 + TOLP$	$\longrightarrow$	$HCHO + 2HO_2 + .17MGLY + .16GLY + .7DCB$
113	$MO_2 + XYLP$	$\longrightarrow$	$HCHO + 2HO_2 + .45MGLY + .806DCB$
114	$MO_2 + TCO_3$	$\longrightarrow$	$.5HCHO + .5ORA2 + .445GLY + .055MGLY +$ $.025ACO_3 + .475CO + .46HO_2 + XO_2$
115	$ETHP + ACO_3$	$\longrightarrow$	$ALD + .5HO_2 + .5MO_2 + .5ORA2$
116	$HC3P + ACO_3$	$\longrightarrow$	$.77ALD + .26KET + .5HO_2 + .5ORA2 + .5MO_2$
117	$HC5P + ACO_3$	$\longrightarrow$	$.41ALD + .75KET + .5HO_2 + .5ORA2 + .5MO_2$
118	$HC8P + ACO_3$	$\longrightarrow$	$.46ALD + 1.39KET + .5HO_2 + .5ORA2 + .5MO_2$
119	$OL2P + ACO_3$	$\longrightarrow$	$.8HCHO + .6ALD + .5HO_2 + .5ORA2 + .5MO_2$
120	$OLTP + ACO_3$	$\longrightarrow$	$.5HCHO + ALD + 0.5HO_2 + .5ORA2 + .5MO_2$
121	$OLIP + ACO_3$	$\longrightarrow$	$.14HCHO + .55KET + .725ALD + .5HO_2 +$ $.5ORA2 + .5MO_2$
122	$KETP + ACO_3$	$\longrightarrow$	$MGLY + .5HO_2 + .5ORA2 + .5MO_2$
123	$ACO_3 + ACO_3$	$\longrightarrow$	$2.MO_2$
124	$ACO_3 + TOLP$	$\longrightarrow$	$.17MGLY + .16GLY + .7DCB + HO_2 + MO_2$
125	$ACO_3 + XYLP$	$\longrightarrow$	$MO_2 + .45MGLY + .806DCB + HO_2$
126	$ACO_3 + TCO_3$	$\longrightarrow$	$MO_2 + .11MGLY + .92HO_2 + .89GLY +$ $.05ACO_3 + .95CO + 2.XO_2$
127	$XO_2 + HO_2$	$\longrightarrow$	$OP2$
128	$XO_2 + MO_2$	$\longrightarrow$	$HCHO + HO_2$
129	$XO_2 + ACO_3$	$\longrightarrow$	$MO_2$
130	$XO_2 + XO_2$	$\longrightarrow$	
131	$XO_2 + NO$	$\longrightarrow$	$NO_2$
132	$XNO_2 + NO_2$	$\longrightarrow$	$ONIT$
133	$XNO_2 + HO_2$	$\longrightarrow$	$OP2$
134	$XNO_2 + MO_2$	$\longrightarrow$	$HCHO + HO_2$
135	$XNO_2 + ACO_3$	$\longrightarrow$	$MO_2$
136	$XNO_2 + XNO_2$	$\longrightarrow$	
138	$MO_2 + OLN$	$\longrightarrow$	$1.75HCHO + .5HO_2 + ALD + NO_2$
139	$ACO_3 + OLN$	$\longrightarrow$	$HCHO + ALD + 0.5ORA2 + NO_2 + 0.5MO_2$
140	$OLN + OLN$	$\longrightarrow$	$2HCHO + 2ALD + 2NO_2$

---

# Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde am Institut für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe (TH) und des Forschungszentrums Karlsruhe im Rahmen einer Doktorandenstelle des Forschungszentrums erstellt.

Herrn Prof. Dr. F. Fiedler danke ich für die interessante Themenstellung, die vielen wertvollen Hinweise bei zahlreichen Diskussionen und die kritische Korrektur dieser Arbeit. Herrn Prof. Dr. Ch. Kottmeier sei für die freundliche Übernahme des Korreferats und einige hilfreiche Anregungen gedankt.

Besonderer Dank gilt Herrn Dr. B. Vogel und Frau Dr. H. Vogel für ihre stete Diskussionsbereitschaft, die dem Fortgang dieser Arbeit in großem Maße förderlich war. Sie unterstützten mich bedingungslos in jeder Phase meiner Promotion. Herrn J. Förstner sei für die phantastische Atmosphäre im gemeinsamen Arbeitszimmer und die ungezählten anregenden Diskussionen über fachliche und die EDV betreffende Fragen gedankt. Herrn Dr. N. Kalthoff, Herrn Dr. U. Corsmeier und Herrn M. Kohler sei für ihr großes Engagement bei der Erfassung der Messdaten und viele wertvolle Hinweise gedankt. Herr Ch. Barthlott verdient ein Dankeschön für seine Unterstützung bei der Auswertung der Turbulenzdaten und seine kooperative Art bei vielen Fachgesprächen. Sehr hilfreich waren für mich jederzeit die Anregungen durch die Donnerstagsgespräche, die meinen fachlichen Horizont erweiterten. In diesem Zusammenhang danke ich insbesondere Frau Dr. N. Riemer, Herrn Dr. M. Baldauf, Herrn Dr. M. Hammer und Frau N. Helbig. Frau G. Klinck gilt mein Dank für die stets kompetente und sofortige Unterstützung bei Problemen mit den Rechenanlagen. Allen Teilnehmern der BABII-Messkampagne sei gedankt für ihre große Ausdauer und Einsatzbereitschaft.

Weiterhin danken möchte ich allen Kolleginnen und Kollegen des Instituts für zahllose Diskussionen und das gezeigte Interesse an meiner Arbeit.

Meinen Eltern danke ich für ihre große Unterstützung, die meinen beruflichen Werdegang überhaupt erst ermöglichte. Frau N. Steidl sei für ihre große Geduld und viele Hilfestellungen im Umfeld meiner Arbeit gedankt.





Wissenschaftliche Berichte des  
Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe

Bisher erschienen:

- |         |   |
|---------|---|
| Nr. 1   | Fiedler, F., Prenosil, T.:<br>Das MESOKLIP-Experiment.<br>(Mesoskaliges Klimaprogramm im Oberrheintal). August 1980   |
| Nr. 2:  | Tangermann-Dlugi, G.:<br>Numerische Simulationen atmosphärischer<br>Grenzschichtströmungen über langgestreckten mesoskaligen<br>Hügelketten bei neutraler thermischer Schichtung. August 1982 |
| Nr. 3:  | Witte, N.:<br>Ein numerisches Modell des Wärmehaushalts fließender Gewässer<br>unter Berücksichtigung thermischer Eingriffe. Dezember 1982  |
| Nr. 4:  | Fiedler, F. und Hörschele, K. (Hrsg.):<br>Prof. Dr. Max Diem zum 70. Geburtstag. Februar 1983<br>(vergriffen)   |
| Nr. 5:  | Adrian, G.:<br>Ein Initialisierungsverfahren für numerische mesoskalige<br>Strömungsmodelle.<br>Juli 1985   |
| Nr. 6:  | Dorwarth, G.:<br>Numerische Berechnung des Druckwiderstandes typischer<br>Geländeformen. Januar 1986  |
| Nr. 7:  | Vogel, B., Adrian, G., Fiedler, F.:<br>MESOKLIP-Analysen der meteorologischen Beobachtungen von<br>mesoskaligen Phänomenen im Oberrheingraben. November 1987                                  |
| Nr. 8:  | Hugelmann, C.-P.:<br>Differenzenverfahren zur Behandlung der Advektion. Februar 1988  |
| Nr. 9:  | Hafner, T.:<br>Experimentelle Untersuchungen zum Druckwiderstand der Alpen.<br>April 1988   |
| Nr. 10: | Corsmeier, U.:<br>Analyse turbulenter Bewegungsvorgänge in der maritimen<br>atmosphärischen Grenzschicht. Mai 1988  |

- Nr. 11: Walk, O. and Wieringa, J.(eds):  
Tsumeb Studies of the Tropical Boundary-Layer Climate.  
Juli 1988
- Nr. 12: Degrazia, G. A.:  
Anwendung von Ähnlichkeitsverfahren auf die turbulente  
Diffusion in der konvektiven und stabilen Grenzschicht.  
Januar 1989
- Nr. 13: Schädler, G.:  
Numerische Simulationen zur Wechselwirkung zwischen  
Landoberflächen und atmosphärischer Grenzschicht.  
November 1990
- Nr. 14: Heldt, K.:  
Untersuchungen zur Überströmung eines mikroskaligen  
Hindernisses in der Atmosphäre. Juli 1991
- Nr. 15: Vogel, H.:  
Verteilungen reaktiver Luftbeimengungen im Lee einer Stadt -  
Numerische Untersuchungen der relevanten Prozesse. Juli 1991
- Nr. 16: Höschele, K.(ed.):  
Planning Applications of Urban and Building Climatology -  
Proceedings of the IFHP / CIB-Symposium Berlin,  
October 14-15, 1991. März 1992
- Nr. 17: Frank, H.P.:  
Grenzschichtstruktur in Fronten. März 1992
- Nr. 18: Müller, A.:  
Parallelisierung numerischer Verfahren zur Beschreibung von  
Ausbreitungs- und chemischen Umwandlungsprozessen in der  
atmosphärischen Grenzschicht. Februar 1996
- Nr. 19: Lenz, C.-J.:  
Energieumsetzungen an der Erdoberfläche in gegliedertem  
Gelände. Juni 1996
- Nr. 20: Schwartz, A.:  
Numerische Simulationen zur Massenbilanz chemisch reaktiver  
Substanzen im mesoskaligen Bereich. November 1996

- Nr. 21: Beheng, K.D.:  
Professor Dr. Franz Fiedler  
zum 60. Geburtstag. Januar 1998
- Nr. 22: Niemann, V.:  
Numerische Simulation turbulenter Scherströmungen  
mit einem Kaskadenmodell. April 1998
- Nr. 23: Koßmann, M.:  
Einfluß orographisch induzierter Transportprozesse auf die  
Struktur der atmosphärischen Grenzschicht und die Verteilung  
von Spurengasen. April 1998
- Nr. 24: Baldauf, M.:  
Die effektive Rauigkeit über komplexem Gelände  
- Ein Störungstheoretischer Ansatz. Juni 1998
- Nr. 25: Noppel, H.:  
Untersuchung des vertikalen Wärmetransports durch  
die Hangwindzirkulation auf regionaler Skala. Dezember 1999
- Nr. 26: Kuntze, K.:  
Vertikaler Austausch und chemische Umwandlung von  
Spurenstoffen über topographisch gegliedertem Gelände.  
Oktober 2001
- Nr. 27: Wilms-Grabe, W.:  
Vierdimensionale Datenassimilation als Methode zur  
Kopplung zweier verschiedenskaliger meteorologischer  
Modellsysteme. Oktober 2001
- Nr. 28: Grabe, F.:  
Simulation der Wechselwirkung zwischen Atmosphäre,  
Vegetation und Erdoberfläche bei Verwendung unterschiedlicher  
Parametrisierungsansätze. Januar 2002
- Nr. 29: Riemer, N.:  
Numerische Simulationen zur Wirkung des Aerosols auf die  
troposphärische Chemie und die Sichtweite. Mai 2002
- Nr. 30: Braun, F. J.:  
Mesoskalige Modellierung der Bodenhydrologie. Dezember 2002

- Nr. 31: Kunz, M.:  
Simulation von Starkniederschlägen mit langer Andauer  
über Mittelgebirgen. März 2003
- Nr. 32: Bäumer, D.:  
Transport und chemische Umwandlung von Luftschadstoffen im  
Nahbereich von Autobahnen - numerische Simulationen.  
Juni 2003
- Nr. 33: Barthlott, C.:  
Kohärente Wirbelstrukturen in der atmosphärischen Grenzschicht.  
Juni 2003